

Berechnung von Gleichgewichtskonstanten mit Hilfe der Quantenchemie und Vergleich mit experimentellen Daten bei der Bildung von Halbacetalen

Vom Fachbereich
Maschinenbau und Verfahrenstechnik
der Technischen Universität Kaiserslautern
zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.)
genehmigte Dissertation

vorgelegt von
Frau
Dipl.-Ing. Silke Jaubert
aus Bliesransbach

Kaiserslautern 2011

D 386

Berechnung von Gleichgewichtskonstanten mit Hilfe der Quantenchemie und Vergleich mit experimentellen Daten bei der Bildung von Halbacetalen

Vom Fachbereich

Maschinenbau und Verfahrenstechnik

der Technischen Universität Kaiserslautern

zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.)

genehmigte Dissertation

vorgelegt von

Frau

Dipl.-Ing. Silke Jaubert

aus Bliesransbach

Eingereicht am: 15.11.2010

Mündliche Prüfung am: 11.02.2011

Promotionskommission:

Vorsitzender: Prof. Dr.-Ing. habil. Hans Hasse

Referenten: Prof. Dr.-Ing. habil. Gerd Maurer

Prof. Dipl.-Ing. Dr. techn. Hans-Jörg Bart

Dr.-Ing. Robert Franke

Dekan: Prof. Dr.-Ing. Siegfried Ripperger

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftliche Mitarbeiterin von Herrn Prof. Dr. Gerd Maurer am Lehrstuhl für Technische Thermodynamik der Technischen Universität Kaiserslautern.

Herr Prof. Maurer hat diese Arbeit stets voller Engagement betreut und in jeder Hinsicht unterstützt. Dafür und für die zahlreichen Diskussionen und Anregungen sei ihm an dieser Stelle besonders gedankt.

Bei Herrn Dr. Robert Franke bedanke ich mich für das meiner Arbeit entgegengebrachte Interesse und für die Übernahme des Koreferates. Herrn Prof. Hans-Jörg Bart danke ich für die Übernahme des Koreferates und Herrn Prof. Hans Hasse für die Übernahme des Vorsitzes der Prüfungskommission.

Herrn Prof. Hans-Jörg Krüger danke ich für die Möglichkeit zur Nutzung des NMR-Spektrometers. Herrn Dr. Harald Kelm danke ich für die Unterstützung bei NMR-spektroskopischen Fragen und Frau Christiane Müller für die Unterstützung bei der Durchführung der NMR-spektroskopischen Untersuchungen.

Des Weiteren bedanke ich mich bei allen Mitarbeitern des Lehrstuhls für die angenehme Arbeitsatmosphäre und für die stets gute Zusammenarbeit.

Ganz besonders bedanke ich mich bei meinem Vater für die zahllosen Anregungen und Diskussionen. Außerdem danke ich meiner Familie und insbesondere meinem Mann, dass sie durch ihre Unterstützung und ihr Verständnis zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Kaiserslautern, im Dezember 2011
Silke Jaubert

Abstract

Aldehydes and alcohols are important substances in many technical applications. In solutions of aldehydes and alcohols, hemiacetals are formed. For the design of technical processes with reactive substances, reliable information of the thermodynamic properties, especially the chemical equilibrium, is needed.

For many years, modelling thermodynamic properties of formaldehyde solutions has been a research topic at the University of Kaiserslautern (see for example Hasse [Has90], Peschla [Pes00], Albert [Alb98], Kuhnert [Kuh03]).

In the present work, experimental and theoretical investigations about the reactivity of higher aldehydes with alcohols are done. The experimental results are compared with predictions from quantum chemical calculations to study the possibilities of quantum chemical methods to solve thermodynamic problems on the basis of a technical important example.

Quantitative ^{13}C -NMR-spectroscopy is a powerful tool for the investigation of reaction equilibria and was used to analyse the chemical equilibria. In the present study, mixtures of seven aldehydes and three alcohols were analysed at the temperatures 295 K, 273 K and 255 K. The equilibrium constant K_x dependent on concentration was determined from the ^{13}C -spectra. To get the equilibrium constant K independent on concentration, a correction term to K_x was calculated, K_γ . The required activity coefficients for K_γ are calculated with the group contribution method „modified UNIFAC Dortmund“. Because the consideration of K_γ did not lead to one consistent equilibrium constant K , K_γ is not included in the further investigations.

The used quantum chemical method for the calculations was the density functional theory (DFT) method B3LYP in combination with the small Pople basis set 6-31G(d) scale and the Dunning basis set cc-pVTZ scale. Most calculations were done with the smaller basis set 6-31G(d) scale. The used software package was Gaussian 03.

It was tried to find all stable conformers for all investigated molecules. There are different possibilities to consider the different conformers. In this work, three different variants are used to calculate the equilibrium constant: Variant I considers only the lowest energy conformer of the molecules. Variant II uses the averaged Gibbs energies of the detected conformers of each molecule and variant III utilizes the averaged equilibrium constants of all conformer combinations (cp. 4.2.3.1).

All quantum chemical calculations are gas phase calculations. To compare the calculated results with the experimental values of the equilibrium constants which are liquid phase results, it is necessary to translate the values for K_{Gas} in liquid phase. The required vapour pressures of the pure compounds are calculated with

Antoine equation or if no Antoine parameters are available with four different methods that are integrated in the used program ProPred: Joback/Reid, Constantinou/Gani, Marrero/Gani and Wilson.

The values of the equilibrium constants that are calculated with B3LYP 6-31G(d) scale are up to three orders of magnitude smaller than the experimental values. The mixtures with the aromatic aldehyde 2-chlorobenzaldehyde offer the biggest deviations between experiment and calculation.

The vapour pressure method of Joback/Reid causes values of the equilibrium constants that conform best with the experimental values. However, this method is not able to show the experimental trend in the equilibrium constants: A rising alkyl chain length of the aldehydes leads to a smaller value of the equilibrium constant. Only the calculated values with variant II in combination with the methods of Marrero/Gani, Constantinou/Gani or Wilson can describe the same trend of K_x as in the experimental results.

Only the vapour pressure method of Wilson is independent of the variant able to describe the experimental trend in the equilibrium constants with rising alkyl chain length of the alcohol: Rising alkyl chain length leads to smaller values of the equilibrium constants.

The values of the equilibrium constants that are calculated with B3LYP 6-31G(d) scale are in part in a good agreement with the experimental values. These surprisingly good results are probably the effect of a compensation of different simplifying assumptions.

The values of the equilibrium constants that are calculated with B3LYP cc-pVTZ scale are dependent from the observed system and variant up to three till six orders of magnitude smaller than the experimental values. The mixtures with the aromatic aldehyde 2-chlorobenzaldehyde offer also with the bigger basis set the biggest deviations between experiment and calculation.

The analysis of the values of the calculated equilibrium constants shows that only the values with variant I in combination with the methods of Marrero/Gani, Constantinou/Gani or Wilson can describe the same trend of K_x as in the experimental results (rising alkyl chain length of the aldehydes leads to a smaller value of the equilibrium constant).

With all three variants, the experimentally observed influence of alkyl chain length of the alcohol can only be described with the vapour pressure method of Wilson. Because of the big derivations between the calculated and experimental values of the equilibrium constants, the differences between the different vapour pressure methods are irrelevant.

The combination of B3LYP with cc-pVTZ scale is not able to reproduce well the values of the experimental results of the equilibrium constant, regardless of which variant or vapour pressure method was used.

Both combinations (B3LYP 6-31G(d) scale and B3LYP cc-pVTZ scale) can describe the influence of the temperature of the values of the equilibrium constants quantitatively. All three variants show only with the vapour pressure method of

Wilson the experimental observed trend in the values of the equilibrium constants. However, the values of the equilibrium constants that are calculated with B3LYP cc-pVTZ scale are up to three till four orders of magnitude smaller than the experimental values.

Kurzfassung

Mischungen aus Aldehyden und Alkoholen sind für zahlreiche technische Prozesse von Bedeutung. Bei der Auslegung solcher Prozesse muss berücksichtigt werden, dass Aldehyde mit Alkoholen in einer Additions-Eliminierungsreaktion zu Halbacetalen reagieren. Zurzeit erhält man genaue Angaben zum Reaktionsgleichgewicht, die für technische Anwendungen ausreichend sind, fast ausschließlich aus experimentellen Untersuchungen. Eine Vorhersage solcher Gleichgewichtskonstanten (für Reaktionen in der Gasphase) ist prinzipiell auch mit Hilfe quantenchemischer Methoden möglich. Für die interessierenden Reaktionen der untersuchten Aldehyde und Alkohole fehlen sowohl experimentelle Ergebnisse als auch mit Hilfe der Quantenchemie berechnete Zahlenwerte.

Ziel der Arbeit war es, die Reaktionsgleichgewichte einiger wichtiger Reaktionen eines Aldehyds mit einem Alkohol zu Halbacetalen experimentell zu bestimmen und mit Ergebnissen quantenchemischer Vorhersagen zu vergleichen.

Für 21 Systeme (aus sieben Aldehyden und drei Alkoholen) wurden Pseudogleichgewichtskonstanten in der flüssigen Phase im Temperaturbereich zwischen ca. 255 K und 295 K experimentell mittels ^{13}C -NMR-Spektroskopie ermittelt. Dazu wurden binäre Mischungen aus jeweils einem Aldehyd und einem Alkohol gravimetrisch hergestellt und nach Einstellung des Gleichgewichts experimentell untersucht. Die im Experiment erhaltenen Pseudogleichgewichtskonstanten wurden mit Hilfe einer Gruppenbeitragsmethode für die Gibbsche Exzessenergie der flüssigen Mischungen zu Gleichgewichtskonstanten umgerechnet.

Parallel dazu wurden für die experimentell untersuchten Reaktionen die Gleichgewichtskonstanten in der Gasphase mit quantenchemischen Methoden berechnet. Als quantenchemische Methode wurde der Dichtefunktionaltheorieansatz B3LYP gewählt, der für die Berechnungen sowohl mit dem (kleinen) Pople-Basissatz 6-31G(d) scale als auch mit dem (größeren) Dunning-Basissatz cc-pVTZ scale kombiniert wurde. Im theoretischen Teil wurde nur die Hauptreaktion - die Bildung der Halbacetale I aus Aldehyd und Alkohol - berücksichtigt und die Folgereaktionen nicht untersucht. Aus zeitlichen Gründen konnten für den größeren (rechenzeintensiven) Basissatz nicht alle experimentell untersuchten Reaktionen betrachtet werden. Unter Verwendung von Dampfdrücken der beteiligten Komponenten wurden die Rechenwerte auf die flüssige Phase umgerechnet. Die dazu erforderlichen Dampfdrücke der Halbacetale wurden mit Hilfe von Korrelationsgleichungen abgeschätzt.

Der Vergleich von Messwerten mit Rechenwerten für die Gleichgewichtskonstanten der untersuchten chemischen Reaktionen zeigte, dass die verwendeten quantenchemischen Methoden i.d.R. nicht in der Lage sind, das Gleichgewicht zuverlässig vorherzusagen.

Inhaltsverzeichnis

| | |
|---|-----------|
| Formelzeichen, Abkürzungen und Indizes | XI |
| 1 Einleitung | 1 |
| 2 Aldehyde und Alkohole | 3 |
| 2.1 Aldehyde | 3 |
| 2.2 Alkohole | 4 |
| 2.3 Charakteristische Reaktionen | 4 |
| 3 NMR-Spektroskopie | 7 |
| 3.1 Grundlagen | 7 |
| 3.1.1 Physikalische Grundlagen | 7 |
| 3.1.2 Auswertung der Spektren | 10 |
| 3.2 Experimentelle Bestimmung der Gleichgewichtskonstanten | 11 |
| 3.2.1 Untersuchte Systeme | 12 |
| 3.2.2 Probenherstellung | 12 |
| 3.2.3 NMR-Spektrometer | 13 |
| 3.2.4 Aufnahme der Spektren | 13 |
| 3.3 Ergebnisse | 14 |
| 3.3.1 Auswertung und Interpretation der Spektren | 15 |
| 3.3.2 Bestimmung der Gleichgewichtskonstanten | 26 |
| 3.3.3 Einfluss der Temperatur auf die Gleichgewichtskonstante | 32 |
| 4 Quantenchemie | 39 |
| 4.1 Grundlagen | 39 |
| 4.1.1 Quantenmechanik | 39 |
| 4.1.1.1 Schrödinger-Gleichung | 40 |
| 4.1.2 Quantenchemische Methoden | 41 |
| 4.1.2.1 Dichtefunktionaltheorie | 43 |
| 4.1.3 Basissatz | 46 |
| 4.1.4 Skalierungsfaktoren | 49 |
| 4.2 Durchführung der Berechnungen | 50 |
| 4.2.1 Geometrieoptimierung | 50 |
| 4.2.2 Frequenzberechnung | 51 |
| 4.2.3 Berechnung der Gleichgewichtskonstanten | 52 |
| 4.2.3.1 Berücksichtigung der Konformere | 53 |
| 4.2.4 Verwendete Software | 56 |
| 4.2.5 Betrachtete Moleküle | 57 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 4.2.6 | Verwendete Methoden, Basissätze und ausgewählte Rechenparameter | 57 |
| 4.3 | Ergebnisse | 60 |
| 4.3.1 | Konformere | 60 |
| 4.3.2 | Gleichgewichtskonstanten der ausgewählten Reaktionen . . . | 61 |
| 4.3.2.1 | B3LYP 6-31G(d) scale | 61 |
| 4.3.2.2 | B3LYP cc-pVTZ scale | 63 |
| 4.3.3 | Einfluss der Temperatur auf die Gleichgewichtskonstante . . | 65 |
| 5 | Vergleich und Bewertung von Experiment und Rechnung | 69 |
| 5.1 | Umrechnung der experimentell bestimmten Pseudogleichgewichtskonstanten K_x auf die Gleichgewichtskonstante K | 69 |
| 5.2 | Umrechnung der Rechenergebnisse auf die flüssige Phase | 70 |
| 5.3 | Vergleich und Diskussion | 73 |
| 5.3.1 | B3LYP 6-31G(d) scale | 74 |
| 5.3.2 | B3LYP cc-pVTZ scale | 77 |
| 5.3.3 | Einfluss der Temperatur | 80 |
| 6 | Zusammenfassung | 87 |
| 7 | Literaturverzeichnis | 91 |
| 8 | Anhang | 99 |
| 8.1 | NMR-Spektroskopie | 99 |
| 8.1.1 | Verwendete Chemikalien | 99 |
| 8.1.2 | NMR-Programm | 99 |
| 8.1.3 | NMR-Spektren | 100 |
| 8.1.3.1 | Acetaldehyd + Methanol | 100 |
| 8.1.3.2 | Acetaldehyd + Ethanol | 104 |
| 8.1.3.3 | Acetaldehyd + 1-Propanol | 108 |
| 8.1.3.4 | Propanal + Methanol | 112 |
| 8.1.3.5 | Propanal + Ethanol | 117 |
| 8.1.3.6 | Propanal + 1-Propanol | 121 |
| 8.1.3.7 | Butanal + Methanol | 125 |
| 8.1.3.8 | Butanal + Ethanol | 129 |
| 8.1.3.9 | Butanal + 1-Propanol | 134 |
| 8.1.3.10 | Heptanal + Methanol | 139 |
| 8.1.3.11 | Heptanal + Ethanol | 143 |
| 8.1.3.12 | Heptanal + 1-Propanol | 148 |
| 8.1.3.13 | Decanal + Methanol | 154 |
| 8.1.3.14 | Decanal + Ethanol | 156 |
| 8.1.3.15 | Decanal + 1-Propanol | 160 |
| 8.1.3.16 | 2-Chlorbenzaldehyd + Methanol | 164 |
| 8.1.3.17 | 2-Chlorbenzaldehyd + Ethanol | 170 |
| 8.1.3.18 | 2-Chlorbenzaldehyd + 1-Propanol | 176 |
| 8.1.3.19 | 3-Phenylpropanal + Methanol | 182 |
| 8.1.3.20 | 3-Phenylpropanal + Ethanol | 186 |

| | | |
|-----------|--|-----|
| 8.1.3.21 | 3-Phenylpropanal + 1-Propanol | 192 |
| 8.1.4 | Gleichgewichtskonstanten K_x | 198 |
| 8.1.4.1 | Systeme mit Acetaldehyd | 198 |
| 8.1.4.2 | Systeme mit Propanal | 201 |
| 8.1.4.3 | Systeme mit Butanal | 203 |
| 8.1.4.4 | Systeme mit Heptanal | 206 |
| 8.1.4.5 | Systeme mit Decanal | 209 |
| 8.1.4.6 | Systeme mit 2-Chlorbenzaldehyd | 211 |
| 8.1.4.7 | Systeme mit 3-Phenylpropanal | 214 |
| 8.1.5 | UNIFAC-Parameter | 218 |
| 8.1.6 | Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K | 223 |
| 8.1.6.1 | Systeme mit Acetaldehyd | 223 |
| 8.1.6.2 | Systeme mit Propanal | 226 |
| 8.1.6.3 | Systeme mit Butanal | 230 |
| 8.1.6.4 | Systeme mit Heptanal | 233 |
| 8.1.6.5 | Systeme mit Decanal | 234 |
| 8.1.6.6 | Systeme mit 2-Chlorbenzaldehyd | 234 |
| 8.1.6.7 | Systeme mit 3-Phenylpropanal | 238 |
| 8.2 | Quantenchemie | 239 |
| 8.2.1 | Beispiel für Gaussian-Eingabedatei | 239 |
| 8.2.2 | Konformere und Energien der Moleküle | 241 |
| 8.2.2.1 | B3LYP 6-31G(d) | 241 |
| 8.2.2.1.1 | Aldehyde | 241 |
| 8.2.2.1.2 | Alkohole | 243 |
| 8.2.2.1.3 | Halbacetale 1 | 243 |
| 8.2.2.2 | B3LYP cc-pVTZ | 258 |
| 8.2.2.2.1 | Aldehyde | 258 |
| 8.2.2.2.2 | Alkohole | 259 |
| 8.2.2.2.3 | Halbacetale 1 | 260 |
| 8.2.3 | Gleichgewichtskonstanten des Systems Acetaldehyd mit Me- thanol für verschiedene Methoden | 264 |
| 8.2.4 | Geometrien der Moleküle | 265 |
| 8.2.4.1 | B3LYP 6-31G(d) | 265 |
| 8.2.4.1.1 | Aldehyde | 265 |
| 8.2.4.1.2 | Alkohole | 272 |
| 8.2.4.1.3 | Halbacetale | 275 |
| 8.2.4.2 | B3LYP cc-pVTZ | 300 |
| 8.2.4.2.1 | Aldehyde | 300 |
| 8.2.4.2.2 | Alkohole | 307 |
| 8.2.4.2.3 | Halbacetale | 310 |
| 8.2.5 | Dampfdrücke | 331 |
| 8.2.6 | Berechnete Gleichgewichtskonstanten | 332 |

| | |
|---|------------|
| Betreute Studien- und Diplomarbeiten | 335 |
|---|------------|

| | |
|-------------------|------------|
| Lebenslauf | 337 |
|-------------------|------------|

Formelzeichen, Abkürzungen und Indizes

Formelzeichen

| | |
|-----------------|---|
| a_0, a_x, a_c | semiempirische Parameter |
| a_{ij} | UNIFAC Wechselwirkungsparameter der Gruppen i und j |
| A | Peakfläche |
| B_0 | magnetische Flussdichte |
| b_{ij} | UNIFAC Wechselwirkungsparameter der Gruppen i und j |
| c_{ij} | UNIFAC Wechselwirkungsparameter der Gruppen i und j |
| d | Kontraktionskoeffizient |
| e | Elementarladung |
| E | Energie |
| E_{ee} | Elektron-Elektron-Wechselwirkung |
| E_{ne} | Elektron-Kern-Anziehung |
| E_{XC} | Austausch-Korrelationsenergie |
| f | Auftrittswahrscheinlichkeit |
| $F(x)$ | Funktional von x |
| F_{HK} | Hohenberg-Kohn-Funktional |
| g | Gibbsche Energie |
| h | Plancksches Wirkungsquantum |
| h_V | Verdampfungsenthalpie |
| J | Coulomb-Anteil der Ladungsverteilung |
| \hat{H} | Hamilton-Operator |
| I | Kernspin |
| k | Proportionalitätskonstante |
| K | Gleichgewichtskonstante |
| K_x | Pseudogleichgewichtskonstante |
| K_γ | Korrektur aus Aktivitätskoeffizienten |
| k_B | Boltzmann-Konstante |
| m | Masse |
| n | Molzahl |
| n | Anzahl der Elektronen |
| N | Anzahl der Kerne |
| N_α | Anzahl der Kerne im energieärmeren Niveau |
| N_β | Anzahl der Kerne im energiereicheren Niveau |
| \hat{O} | Operator |
| p_i | Partialdruck der Komponente i |
| p_i^S | Dampfdruck der Komponente i |

| | |
|------------|--|
| p^θ | Standarddruck (0,1 MPa) |
| p | Druck |
| P | Drehimpuls |
| q | Oberflächenparameter UNIFAC |
| r | Volumenparameter UNIFAC |
| T | Temperatur |
| r_{ij} | Abstand zwischen zwei Elektronen i und j |
| R | allgemeine Gaskonstante |
| R_{AB} | Abstand zwischen zwei Kernen A und B |
| \hat{T} | Operator der kinetischen Energie |
| \hat{V} | Operator der potentiellen Energie |
| s | Spinkoordinaten |
| x | Molanteil in der flüssigen Phase |
| y | Molanteil in der Gasphase |
| Z | Kernladung |

Griechische Formelzeichen

| | |
|-----------------|---|
| δ | chemische Verschiebung |
| ϵ_{XC} | Austauschkorrelationsenergie pro Partikel |
| η | Basisfunktion |
| ΔE | Energiedifferenz |
| φ_i | Einelektronenfunktionen |
| γ | Aktivitätskoeffizient |
| γ | magnetogyrisches Verhältnis |
| μ | chemisches Potential |
| μ | magnetisches Moment |
| ∇^2 | Laplace-Operator |
| ν | Frequenz |
| Ψ | Wellenfunktion |
| ρ | Elektronendichte |
| σ | Abschirmungskonstante |
| Θ | Slater-Determinante |

Abkürzungen

| | |
|-----|--------------------|
| 2-C | 2-Chlorbenzaldehyd |
| 3-P | 3-Phenylpropanal |
| 1-P | 1-Propanol |
| A | Acetaldehyd |
| Ald | Aldehyd |
| Alk | Alkohol |
| AM1 | Austin Model 1 |
| B | Butanal |
| ber | berechnet |
| D | Decanal |

| | |
|------|--|
| DFT | Dichtefunktionaltheorie |
| E | Ethanol |
| exp | experimentell |
| FA | Formaldehyd |
| GGA | Generalized Gradient Approximations |
| GTO | Gaussian-type-orbitals |
| H | Heptanal |
| HA 1 | Halbacetal 1 |
| HA 2 | Halbacetal 2 |
| HA 3 | Halbacetal 3 |
| HF | Hartree-Fock |
| LDA | Local Density Approximations |
| M | Methanol |
| MNDO | Modified Neglect of Differential Overlap |
| NMR | Nuclear magnetic resonance |
| P | Propanal |
| PM3 | Parameterized Model number 3 |
| NMR | Nuclear Magnetic Resonance |
| STO | Slater-type-orbitals |
| TMS | Tetramethylsilan |
| V | Variante |
| VA | Vollacetal |
| W | Wasser |

Indizes

| | |
|-----|--------------------------------------|
| 0 | Ausgangszustand |
| A | Kern A |
| B | Kern B |
| C | Korrelationsbeitrag |
| e | Elektron |
| i | Komponente i |
| j | Komponente j |
| ges | gesamt |
| KS | Kohn-Sham |
| R | Reaktion |
| S | nichtwechselwirkendes Referenzsystem |
| X | Austauschbeitrag |

Definitionen

| | |
|------------------|--|
| Relativer Fehler | $\Delta z = \frac{z^{ber} - z^{exp}}{z^{exp}}$ |
| Absoluter Fehler | $\Delta z = z^{ber} - z^{exp}$ |

1 Einleitung

Aldehyde und Alkohole kommen in vielen technischen Anwendungen als Edukte, Zwischenprodukte oder Produkte vor. Aldehyde können mit Alkoholen unter Bildung von Halbacetalen bzw. Acetalen reagieren.

Um technische Prozesse mit solchen Stoffen auszulegen, müssen die thermodynamischen Eigenschaften der (reagierenden) Mischungen bekannt sein. Dabei interessiert insbesondere das chemische Gleichgewicht der Mischungen.

Aldehyde reagieren mit Alkoholen in einer Additions-Eliminierungsreaktion zu Halbacetalen. Aufgrund der großen Bedeutung von Aldehyden und Alkoholen beschäftigten sich bereits einige Arbeiten (z. B. Herold und Wolf [HW31], Herold-Kiel [HK33], Bell und Clunie [BC51], Hooper [Hoo67], Le Hénaff [Hén67], [Hén68], Wiberg et al. [WS81], [WMM94], Morgan [Mor94]) mit Reaktionen der Carbonylgruppe mit Alkoholen oder auch mit Wasser.

Die vorliegende Arbeit knüpft an Untersuchungen am Lehrstuhl (vgl. z. B. Hasse [Has90], Albert [Alb98], Kuhnert [Kuh03]) an, die Reaktionen in formaldehydhaltigen Systemen behandelten. Formaldehyd ist eine der reaktivsten organischen Verbindungen. Eine der charakteristischen Reaktionen dieses kleinsten Aldehyds ist die Bildung von Halbacetalen bzw. Oligomeren in Anwesenheit von Alkoholen bzw. Wasser.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit soll die Reaktivität von höheren Aldehyden mit Alkoholen experimentell und theoretisch untersucht werden. Für die experimentellen Untersuchungen wurden Mischungen aus höheren Aldehyden und Alkoholen in unterschiedlichen Konzentrationen hergestellt und die Gleichgewichtskonstanten der Reaktionen bei drei Temperaturen (295 K, 273 K, 255 K) mit Hilfe der NMR-Spektroskopie bestimmt. Parallel dazu wurden für die experimentell untersuchten Systeme die Gleichgewichtskonstanten der Reaktionen mit quantenchemischen Methoden berechnet. Die Arbeiten sollten dazu dienen, an einem technisch wichtigen Beispiel die Möglichkeiten quantenchemischer Methoden bei der Lösung ingenieurwissenschaftlicher, thermodynamischer Probleme zu erforschen.

Für die experimentellen Untersuchungen wurde die NMR-Spektroskopie ausgewählt, da sie quantitative Aussagen ohne vorherige Kalibrierung ermöglicht und für die Analyse von komplexen Mehrkomponentengemischen und Mischungen von chemisch ähnlichen Komponenten gut geeignet ist. Dieses noninvasive Verfahren eignet sich besonders gut, wenn sich die chemisch reagierenden Mischungen, wie im Falle der im reinen Zustand instabilen Halbacetale, nur schwer trennen lassen. Um die quantenchemischen Berechnungen durchführen zu können, müssen zunächst die „quantenchemische Methode“ und der „Basissatz“ ausgewählt werden. Diese Aufgaben sollten mit Hilfe experimentell bestimmter Gleichgewichtskonstanten aus früheren Arbeiten am Lehrstuhl mit Mischungen aus Formaldehyd und Methanol sowie Literaturdaten gelöst werden. Die dabei gefundenen Methoden wurden auf die im Rahmen der vorliegenden Arbeit ausgewählten Mischungen angewendet.

2 Aldehyde und Alkohole

Sowohl Aldehyde als auch Alkohole sind wichtige Ausgangsstoffe, Zwischenprodukte bzw. Produkte in der chemischen Industrie. Zur Trennung und Aufbereitung von Mischungen, die Aldehyde und Alkohole enthalten, ist es wichtig, die ablaufenden chemischen Reaktionen und die Lage des Gleichgewichts zu kennen.

2.1 Aldehyde

Aldehyde sind Kohlenwasserstoffverbindungen, die als funktionelle Gruppe eine endständige Aldehyd- oder Carbonylgruppe enthalten (vgl. Abbildung 2.1):

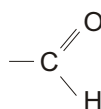


Abbildung 2.1: Aldehydgruppe

Der Begriff Aldehyd leitet sich von dem lateinischen Begriff *alkohol dehydrogenatus* („Alkohol, dem Wasserstoff entzogen wurde“) ab [BW88]. Das chemische Verhalten der Aldehyde wird hauptsächlich durch die Reaktivität der Carbonylgruppe festgelegt: Aldehyde neigen insbesondere zu Additions- und Kondensationsreaktionen. Man unterscheidet zwischen aliphatischen und aromatischen Aldehyden. Bei aliphatischen Aldehyden sitzt die funktionelle Gruppe an einer Alkylgruppe. Aufgrund der Polarität der Aldehydgruppe sind kurzkettige, aliphatische Aldehyde gut wasserlöslich. Mit steigender Kettenlänge nimmt der unpolare Anteil zu und die Wasserlöslichkeit ab. Kurzkettige Aldehyde stellen in der organischen Chemie wichtige Zwischenprodukte, z. B. zur Herstellung von Kunststoffen, dar und dienen als Desinfektions- und Konservierungsmittel. Längerkettige Aldehyde werden z. B. als Riechstoffe in der Parfümindustrie verwendet.

Aromatische Aldehyde sind Aldehyde, deren funktionelle Gruppe direkt an einen Benzolkern gebunden ist. Sie unterscheiden sich bezüglich ihrer Reaktionen und Eigenschaften nicht wesentlich von aliphatischen Aldehyden. Aromatische Aldehyde (z. B. Benzaldehyd) sind Rohstoffe zur Herstellung von z. B. Medikamenten, Parfümen und Farbstoffen. Für weitere Informationen über Aldehyde wird auf die Literatur verwiesen: z. B. Beyer und Walter [BW88], Fieser und Fieser [FF68], Ullmann [Ull96] oder Beilstein [Bei97].

2.2 Alkohole

Alkohole sind Kohlenwasserstoffverbindungen, deren funktionelle Gruppe die Hydroxy-Gruppe (OH-Gruppe) ist.

Man teilt die Alkohole bezüglich der Anzahl und der Stellung der funktionellen Gruppe ein: Alkohole mit einer OH-Gruppe bezeichnet man als einwertig, Alkohole mit zwei bzw. drei OH-Gruppen als zwei- bzw. dreiwertig. Bei der Einteilung bzgl. der Stellung der funktionellen Gruppe unterscheidet man zwischen primären, sekundären und tertiären Alkoholen. Bei primären Alkoholen besitzt das C-Atom an das die OH-Gruppe gebunden ist, eine Bindung zu einem weiteren C-Atom, bei sekundären Alkoholen zwei und bei tertiären Alkoholen drei Bindungen zu weiteren C-Atomen.

Kurzkettige einwertige Alkohole sind farblose, neutrale Flüssigkeiten mit charakteristischem Geruch. Die Wasserlöslichkeit von Alkoholen hängt von der Länge der Kohlenwasserstoffkette ab: Methanol, Ethanol und Propanol sind z. B. in jedem Verhältnis mit Wasser mischbar, da die polare Hydroxygruppe eine gute Wasserlöslichkeit bewirkt. Mit steigender Kettenlänge wird der Einfluss der Kohlenwasserstoffkette größer, so dass langkettige Alkohole in ihren physikalischen Eigenschaften den Alkanen ähnlich sind.

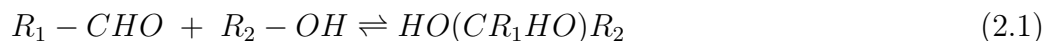
Kurzkettige Alkohole werden z. B. als Lösungsmittel für Farben und Lacke, als Desinfektionsmittel und in der Kosmetikindustrie verwendet.

Mehrwertige Alkohole finden sich u. a. in Schmierölen, Fetten, Hautcremes oder Frostschutzmitteln. Für weitere Informationen über Alkohole wird auf folgende Literaturstellen verwiesen: z. B. Beyer und Walter [BW88], Fieser und Fieser [FF68], Ullmann [Ull96] oder Beilstein [Bei97].

2.3 Charakteristische Reaktionen

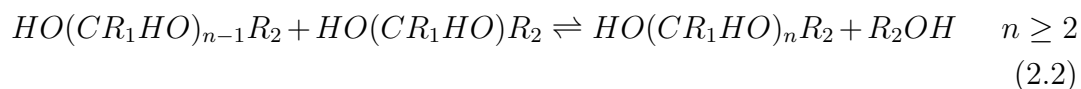
Sowohl Aldehyde als auch Alkohole sind sehr reaktive Verbindungen. In diesem Kapitel werden nur die für die vorliegende Arbeit relevanten Reaktionen angesprochen. Für weitere Informationen wird auf folgende Literatur verwiesen: Beyer und Walter [BW88], Sykes [Syk76], Fieser und Fieser [FF68], Ullmann [Ull96] und Beilstein [Bei97].

Aldehyde reagieren mit Alkoholen in einer Additionsreaktion zu Halbacetalen:

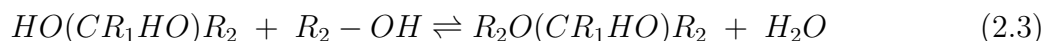


Halb- oder Hemiacetale haben als funktionelle Gruppe am selben C-Atom sowohl eine Hydroxygruppe (OH-Gruppe) als auch eine Alkoxygruppe (OR-Gruppe). Halbacetale sind meist instabile Verbindungen, die nur in wenigen Fällen rein gewonnen werden können (d. h. sie liegen im chemischen Gleichgewicht mit anderen Stoffen vor).

Halbacetale können unter Abspaltung des Alkohols zu längerkettigen Halbacetalen polymerisieren:



In Gegenwart von Säuren können Halbacetale zu Acetalen weiterreagieren, wobei gleichzeitig Wasser abgespalten wird:



Die Stoffklasse der Acetale ist dadurch gekennzeichnet, dass zwei Alkoxygruppen an ein Kohlenstoffatom gebunden sind. Acetale sind sehr beständig gegen Alkalien, können aber in Gegenwart von verdünnten Säuren unter Hydrolyse in Aldehyd und Alkohol gespalten werden. Man spricht deshalb davon, dass in Acetalen eine „geschützte Aldehydgruppe“ vorliegt. Sie werden deshalb manchmal anstelle von Aldehyden bei Synthesen verwendet.

3 NMR-Spektroskopie

Die NMR-Spektroskopie (Nuclear Magnetic Resonance) ist ein noninvasives, analytisches Verfahren, das sowohl für qualitative als auch für quantitative Analysen verwendet wird. Es eignet sich gut für die rückwirkungsfreie Untersuchung der Eigenschaften von komplexen Mehrkomponentengemischen und Mischungen mit chemisch ähnlichen Komponenten, die in vielen technischen Prozessen zu finden sind. Dies ist insbesondere dann von Vorteil, wenn sich die Komponenten der chemisch reagierenden Mischungen nicht trennen lassen. Mit Hilfe der NMR-Spektroskopie ist es außerdem möglich, detaillierte Informationen über die Struktur chemischer Verbindungen zu erhalten. Neben den Informationen zur Struktur der untersuchten Moleküle ist auch eine quantitative Konzentrationsbestimmung möglich, die - im Gegensatz zu anderen Spektroskopieverfahren - keine Kalibrierung erfordert. Im Folgenden wird kurz auf die Grundlagen der NMR-Spektroskopie und die Auswertung der Spektren eingegangen, für weitere Informationen wird auf einschlägige Literatur z. B. Claridge [Cla99], Günther [Gün92], Friebolin [Fri99], Abraham [AFL88], Kalinowski, Berger und Braun [KBB84] oder Kleinpeter [Kle92] verwiesen.

3.1 Grundlagen

3.1.1 Physikalische Grundlagen

Die magnetischen Eigenschaften der Atomkerne sind Grundlage der NMR-Spektroskopie. Nur Atomkerne mit einer ungeraden Kernladungszahl wie z. B. ^1H , ^{13}C und ^{17}O besitzen einen Kernspin I und damit einen Drehimpuls P , der in den Atomkernen ein magnetisches Moment μ bewirkt. Da Atomkerne mit einem Kernspin von null kein magnetisches Moment besitzen, sind die Isotope ^{12}C und ^{16}O , die Hauptbestandteile von organischen Verbindungen, NMR-spektroskopisch nicht nachweisbar. Der Drehimpuls und das magnetische Moment sind über eine charakteristische Stoffkonstante, das magnetogyrische Verhältnis γ , miteinander verknüpft:

$$\mu = \gamma \cdot P \quad (3.1)$$

Das magnetische Moment kann ohne äußeres Magnetfeld in alle Raumrichtungen zeigen. Sowohl Kernspin als auch das magnetische Moment sind laut Quantentheorie gequantelt und bestimmen die möglichen Zustände, in denen ein Atom im Magnetfeld existieren kann. Wird ein Atomkern in ein statisches Magnetfeld mit der magnetischen Flussdichte B_0 gebracht, existieren für die Ausrichtung relativ

zum Feld nur eine bestimmte Anzahl von möglichen Orientierungen. Im einfachsten Fall sind dies für Kerne mit Kernspin $I = 1/2$ (z. B. ^1H - und ^{13}C -Kerne) genau zwei mögliche Zustände: parallel oder antiparallel zur Feldrichtung. Dieses Verhalten der Kerne wird als Richtungsquantelung bezeichnet. Kerne, deren magnetische Momente parallel zur Feldrichtung orientiert sind, besitzen eine niedrigere Energie als antiparallel ausgerichtete Kerne. Der Energieunterschied zwischen den beiden Energieniveaus beträgt:

$$\Delta E = \gamma \hbar B_0. \quad (3.2)$$

\hbar ist definiert als $\frac{h}{2\pi}$, wobei h das Plancksche Wirkungsquantum ist. Die Verteilung der Kerne auf die Energieniveaus wird durch eine Boltzmann-Verteilung beschrieben:

$$\frac{N_\beta}{N_\alpha} = e^{-\Delta E/k_B T} \quad (3.3)$$

Dabei ist N_β die Anzahl der Kerne im energiereicheren, N_α die Anzahl der Kerne im energieärmeren Niveau, k_B die Boltzmann-Konstante und T die Temperatur. In der Abbildung 3.1 ist, abhängig von der magnetischen Flussdichte B_0 , schematisch die Verteilung der Kerne auf den Grundzustand und auf den angeregten Zustand zu sehen.

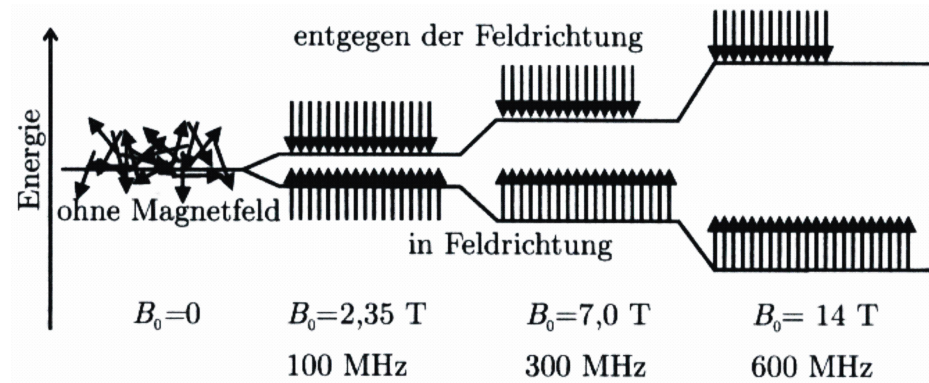


Abbildung 3.1: Verteilung der Atomkerne auf die Energieniveaus bei Einwirkung eines äußeren Magnetfeldes [Böt05]

Tesla [T] ist die Einheit der magnetischen Flussdichte. NMR-Geräte werden üblicherweise durch die eingestrahlte Frequenz und nicht durch die dadurch erzeugte magnetische Flussdichte charakterisiert.

Aus der Abbildung 3.1 lässt sich ableiten, dass mit steigender Flussdichte bzw. Frequenz der energetische Unterschied und damit die Empfindlichkeit der Messmethode zunimmt. Da der Grundzustand energetisch günstiger als der angeregte Zustand ist, ist dieser immer mit mehr Atomkernen besetzt. Allerdings ist der Energieunterschied ΔE für alle Kerne im Vergleich zur mittleren Energie der Translationsbewegung sehr klein. Dadurch liegt der Überschuss im energieärmeren Niveau nur im

Bereich von tausendstel Promille [Fri99]. Übergänge zwischen den verschiedenen Energieniveaus werden im NMR-Experiment durch die Bestrahlung der Kerne mit einer elektromagnetischen Welle der Energie

$$\Delta E = h\nu \quad (3.4)$$

induziert, wenn für die Anregung der Kerne die Resonanzbedingung

$$\Delta E = h\nu = \gamma\hbar B_0 \quad (3.5)$$

erfüllt wird. Für die Resonanzfrequenz der Kerne ergibt sich aus den Gleichungen (3.2), (3.4) und (3.5):

$$\nu = \left| \frac{\gamma}{2\pi} \right| B_0. \quad (3.6)$$

Eine Energieabsorption entspricht einem Übergang vom energieärmeren ins energiereichere Niveau, eine Energieemission einem Übergang vom energiereicheren ins energieärmere Niveau. Beide Vorgänge sind möglich und gleich wahrscheinlich. Durch den Besetzungsüberschuss im energieärmeren Niveau finden mehr Energieabsorptionen als Energieemissionen statt. Dieser Unterschied wird als Signal gemessen, dessen Intensität proportional zum Besetzungsunterschied und damit auch proportional zur Anzahl der Spins in der Probe, d. h. der Konzentration, ist. Da der Besetzungszahlenunterschied sehr gering ist, erhält man nur schwache Signale. Deshalb müssen mehrere Aufnahmen hintereinander aufgenommen und die Signale addiert werden. Bei der Aufnahme eines Spektrums wird durch Bestrahlung der zu untersuchenden Probe mit der Resonanzfrequenz das thermische Gleichgewicht gestört. Dadurch ändert sich das Besetzungsverhältnis und es entsteht eine Quermagnetisierung. Die Zeit, die das System benötigt, um wieder den Gleichgewichtszustand einzunehmen, wird Relaxationszeit genannt. Es wird zwischen zwei Relaxationsvorgängen unterschieden: Relaxation in Feldrichtung, die durch die longitudinale Relaxationszeit T_1 gekennzeichnet ist und der Relaxation senkrecht zur Feldrichtung, die durch die transversale Relaxationszeit T_2 charakterisiert wird. Die Relaxationszeit T_1 ist bei der Durchführung von quantitativen Messungen von großer Bedeutung. Um quantitativ verwertbare Informationen aus Spektren erhalten zu können, muss vor jeder neuen Messung (vor jedem neuen Impuls) abgewartet werden, bis die Kerne wieder im Gleichgewichtszustand sind und neu angeregt werden können. In der Regel wartet man $5 \cdot T_1$ ab, bevor die nächste Pulsanregung erfolgt. Dies entspricht einer Erholung der Magnetisierung von mindestens 99,3%.

In Molekülen sind Atomkerne immer von ihren eigenen Elektronen und anderen Nachbaratomkernen umgeben. Dies bewirkt, dass das am Kern wirkende Magnetfeld stets kleiner ist, als das angelegte Feld. Diesen Effekt bezeichnet man als Abschirmung.

$$B_{eff} = B_0 - \sigma \cdot B_0 \quad (3.7)$$

Die Abschirmungskonstante σ ist eine dimensionslose Größe und wird nur durch die elektronische und magnetische Umgebung der betrachteten Kerne bestimmt. Damit ergibt sich für die Resonanzbedingung (vgl. Gl. 3.6)

$$\nu = \frac{\gamma}{2\pi}(1 - \sigma)B_0. \quad (3.8)$$

Aus Gleichung 3.8 folgt, dass die Resonanzfrequenz proportional zum Abschirmungsterm $(1 - \sigma)$ ist. Daraus lässt sich ableiten, dass chemisch nicht äquivalente Kerne unterschiedlich abgeschirmt sind und im NMR-Spektrum getrennte Resonanzsignale liefern. D. h., die Resonanzfrequenz von Atomkernen ist abhängig von ihrer Position im Molekül. Daraus lässt sich eine Fülle von Informationen über das untersuchte Molekül ableiten.

Da Resonanzfrequenz und magnetische Flussdichte durch die Resonanzbedingung miteinander verknüpft sind, gibt es in der NMR-Spektroskopie keinen absoluten Maßstab. Um die Spektren verschieden starker Spektrometer vergleichen zu können, wird ein relativer Maßstab verwendet, bei dem die Frequenzdifferenz zwischen dem Resonanzsignal der zu untersuchenden Substanz und dem einer Referenzsubstanz gemessen wird. Diese dimensionslose Größe bezeichnet man als chemische Verschiebung δ :

$$\delta = \frac{\nu_{Substanz} - \nu_{Referenz}}{\nu_{Referenz}} \cdot 10^6. \quad (3.9)$$

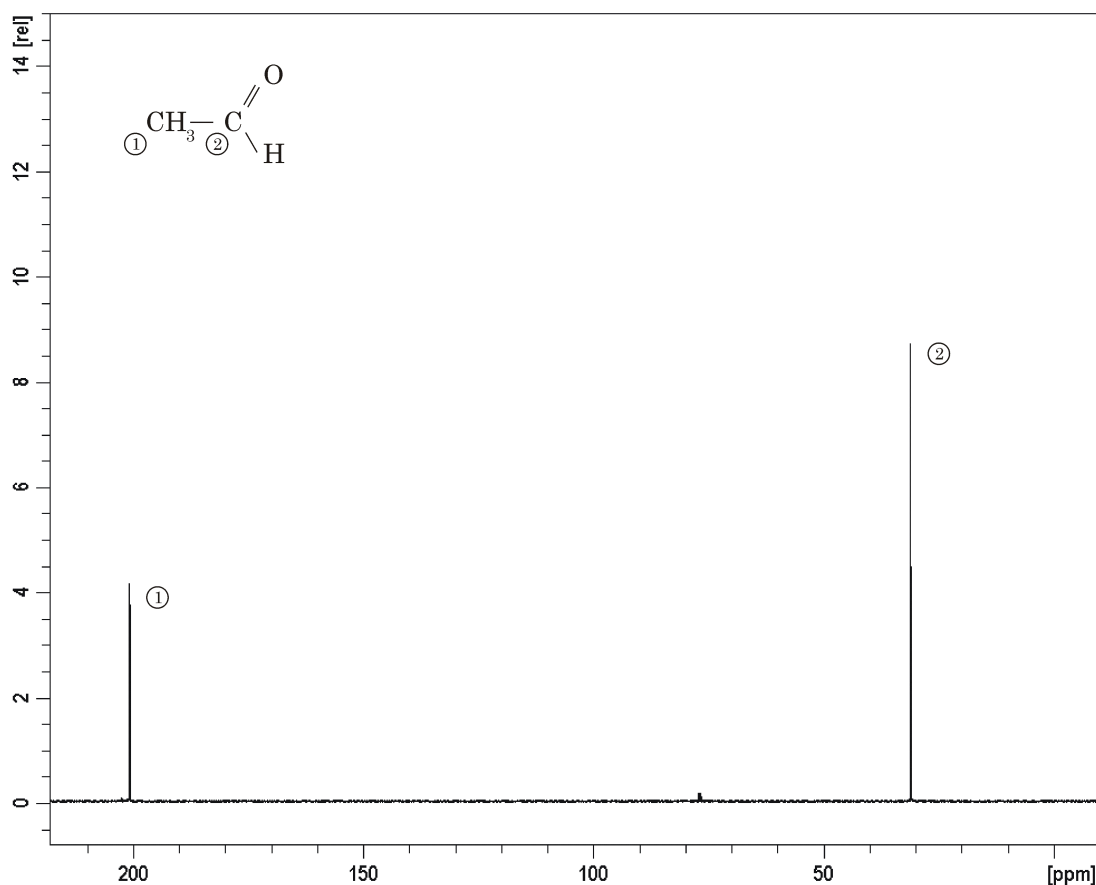
Bei der Zuordnung von Signalen im NMR-Spektrum ist die chemische Verschiebung ein wichtiges Hilfsmittel. Je geringer die Atomkerne im Molekül abgeschirmt werden, umso höher sind die δ -Werte der zugehörigen Signale im Spektrum. Als Referenzsubstanz wird in der ^{13}C -NMR-Spektroskopie meistens Tetramethylsilan (TMS) verwendet.

Zusätzlich zur Referenzsubstanz wird in vielen NMR-Experimenten ein deuteriertes Lösungsmittel eingesetzt, das sowohl für den „Lock“ (Frequenzstabilisierung) als auch für den „Shim“ (Magnetfeldhomogenität) während des NMR-Experiments verwendet wird.

3.1.2 Auswertung der Spektren

Bei der Analyse der NMR-Spektren wird ausgenutzt, dass Atome, die sich in unterschiedlichen (funktionellen) Gruppen befinden, im Spektrum in unterschiedlichen, charakteristischen Bereichen Signale liefern.

In der Abbildung 3.2 ist als Beispiel ein ^{13}C -Spektrum von Acetaldehyd gezeigt. Jedes C-Atom im Molekül führt zu einem Signal im ^{13}C -Spektrum. In Acetaldehyd sind 2 C-Atome enthalten: Ein C-Atom in einer Aldehydgruppe (CHO), die zu den am schwächsten abgeschirmten Kernen gehören und deren Signale typischerweise

Abbildung 3.2: ^{13}C -Spektrum von Acetaldehyd

im Bereich von $\delta = 190 - 220$ liegen und ein primäres C-Atom in einer Methylgruppe (CH_3), deren Signale sich im Bereich von $\delta = 5 - 35$ befinden. Im dargestellten Beispiel liefert das C-Atom aus der Aldehyd-Gruppe ein Signal bei $\delta \approx 200$, das C-Atom aus der CH_3 -Gruppe bewirkt ein Signal bei $\delta \approx 30$.

Bei der quantitativen Auswertung von NMR-Spektren wird davon ausgegangen, dass die Anzahl der angeregten Kerne direkt proportional zur jeweiligen Peakfläche des Signals ist. Die Größe eines Signals wird durch Integration der Fläche unter dem Peak bestimmt. Da üblicherweise alle Proportionalitätsfaktoren gleichgesetzt werden, existiert ein direkter Zusammenhang zwischen den Molzahlen n_i der zu untersuchenden Komponente i und deren Peakfläche A_i :

$$n_i = A_i \quad (3.10)$$

3.2 Experimentelle Bestimmung der Gleichgewichtskonstanten

Bei den in der vorliegenden Arbeit untersuchten Systemen handelt es sich um Lösungen aus verschiedenen, chemisch reagierenden Komponenten, die chemisch

ähnlich und teilweise nicht stabil sind. Die NMR-Spektroskopie eignet sich deshalb sehr gut, um die Gleichgewichtskonzentrationen der einzelnen Komponenten in den Mischungen und daraus die konzentrationsabhängige Gleichgewichtskonstante K_x zu bestimmen.

3.2.1 Untersuchte Systeme

Es wurden binäre, flüssige Lösungen aus einem der folgenden sieben aliphatischen bzw. aromatischen Aldehyde

- Acetaldehyd
- Propanal
- Butanal
- Heptanal
- Decanal
- 3-Phenylpropanal
- 2-Chlorbenzaldehyd

und einem der drei Alkohole

- Methanol
- Ethanol
- 1-Propanol

in jeweils fünf verschiedenen Konzentrationen hergestellt und mit Hilfe der ^{13}C -NMR-Spektroskopie bei drei verschiedenen Temperaturen (295 K, 273 K, 255 K) untersucht.

3.2.2 Probenherstellung

Die Proben für die NMR-Experimente wurden aus Aldehyd und Alkohol in zylindrischen NMR-Proberöhrchen mit einem Außendurchmesser von 5 mm mit Hilfe einer Analysewaage (Mettler Gießen, Modell AG 204; Messgenauigkeit: $\pm 0,0001$ g) eingewogen. Sowohl für den „Lock“ als auch für den „Shim“ wurde das deuterierte Lösungsmittel Chloroform (CDCl_3) verwendet. Das deuterierte Lösungsmittel und die verwendete Referenzsubstanz TMS wurden nicht direkt zu der Mischung in das NMR-Proberöhrchen gegeben (intern), sondern in eine getrennte Kapillare gefüllt (extern), die anschließend abgeschmolzen und in das NMR-Proberöhrchen eingesetzt wurde (vgl. Abbildung 3.3). Das Spektrum wurde lösungsmittelunabhängig aufgenommen, da sich das Lösungsmittel in einer getrennten Kapillare befand. Das NMR-Proberöhrchen muss über eine Füllhöhe von mindestens 40 mm verfügen, um eine störungsfreie Messung zu gewährleisten. Nachdem die NMR-Proberöhrchen gefüllt waren, wurden sie in flüssigem Stickstoff eingefroren, evakuiert und abgeschmolzen. Durch das Abschmelzen der Proben sollte sichergestellt werden, dass die Proben fest verschlossen waren. Dies war erforderlich, da die Proben bei verschiedenen Temperaturen vermessen wurden und sichergestellt sein musste, dass

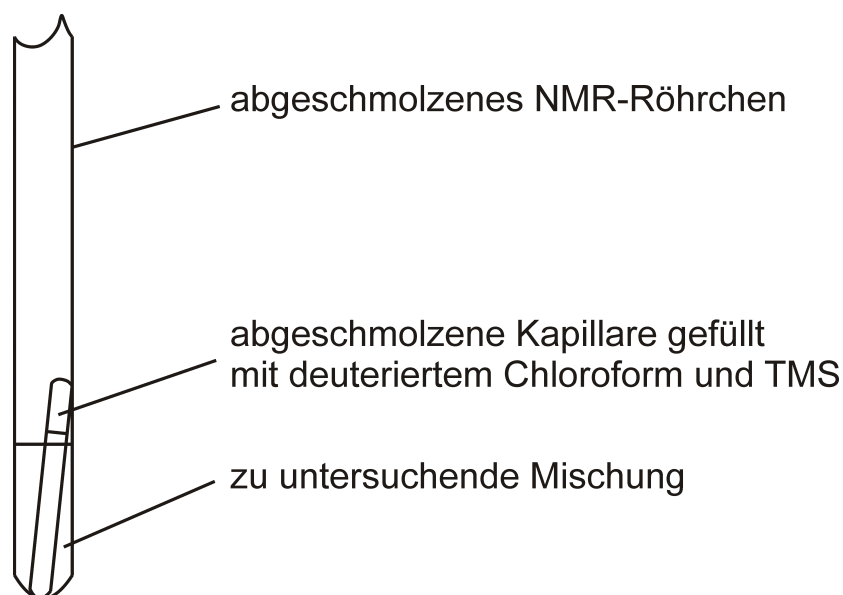


Abbildung 3.3: Gefülltes NMR-Röhrchen

die Zusammensetzung der Probe bei jeder Messung gleich war. Die Proben wurden zwei bis drei Tage bei der späteren Messtemperatur (295 K, 273 K, 255 K) aufbewahrt, um sicherstellen, dass sich das chemische Gleichgewicht eingestellt hatte. Die Lagerung der Proben, die bei 273 K bzw. 255 K gemessen wurden, erfolgte in einem mit Ethanol befüllten Kryostaten.

3.2.3 NMR-Spektrometer

Die Abbildung 3.4 zeigt den prinzipiellen Aufbau eines NMR-Spektrometers. Die wichtigsten Komponenten sind ein starker, meist supraleitender Magnet sowie der Hochfrequenzsender und der Hochfrequenzempfänger. Die zu untersuchende Substanz wird (im NMR-Röhrchen) dem Magnetfeld ausgesetzt. Im sogenannten Probenkopf liefert eine Spule die Hochfrequenzstrahlung und das entstehende Signal wird entweder durch die gleiche oder eine separate Spule empfangen. Nachdem das Spektrum verstärkt wurde kann die Resonanzfrequenz bestimmt werden.

3.2.4 Aufnahme der Spektren

Bei der Aufnahme von Spektren wird heute die Puls-Fourier-Transformationstechnik verwendet, d. h. es wird ein sehr kurzer energiereicher Anregungspuls ausgesendet, um gleichzeitig alle Kerne einer Sorte anzuregen. Die Überlagerung der Magnetisierung der angeregten Kerne wird von der Empfängerspule detektiert und das so erhaltene Signal als FID (free induction decay) bezeichnet. Die Frequenzanteile der interferierenden Signale werden durch Fourier-Transformation von der Zeitdomäne in die Frequenzdomäne überführt.

Um die Konzentrationen der einzelnen Komponenten im chemischen Gleichgewicht zu bestimmen, wird die ^{13}C -NMR-Spektroskopie verwendet. Diese besitzt im Vergleich zur ^1H -NMR-Spektroskopie den Vorteil, dass die ^{13}C -Resonanzen der un-

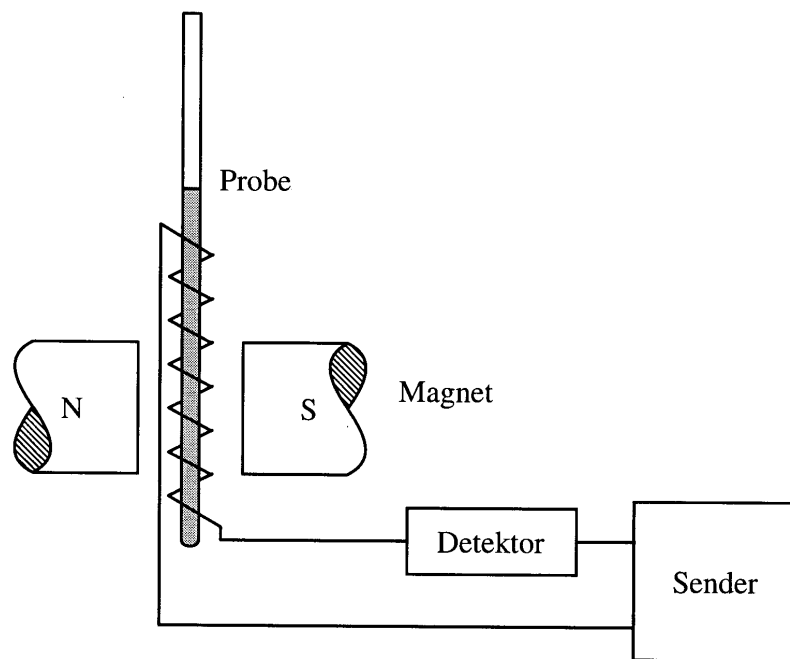


Abbildung 3.4: Schematischer Aufbau eines NMR-Spektrometers [Sie96]

tersuchten Moleküle in dem sehr großen Bereich der chemischen Verschiebung von 0 ppm bis ca. 220 ppm liegen. Dadurch erreicht man eine bessere Auflösung der Spektren, da die Signale sich weniger überlagern, wodurch die quantitative Auswertung der Spektren erleichtert wird. Da im ^{13}C -Spektrum nur das mit einer niedrigen, relativen Häufigkeit von 1,108 % vorkommende NMR-aktive ^{13}C -Isotop Signale liefert, müssen mehrere Spektren aufgenommen werden, um ein ausreichend gutes Signal-Rausch-Verhältnis und dadurch quantitativ auswertbare Informationen zu erhalten. Dabei muss berücksichtigt werden, dass ^{13}C -Kerne lange T_1 -Relaxationszeiten haben und dadurch ^{13}C -Spektren nur in großen Zeitabständen aufgenommen werden können. Die ^{13}C -NMR-Spektroskopie wird deshalb hauptsächlich für quantitative Gleichgewichtsmessungen und für Strukturaufklärungen und weniger zur Aufklärung kinetischer Vorgänge verwendet.

Für die Untersuchungen in der vorliegenden Arbeit wurde ein Bruker Avance 600 MHz (Ultrashield) NMR-Spektrometer verwendet. Bei der Aufnahme der Spektren wurden 64 bzw. 128 Spektren mit einer T_1 -Relaxationszeit von 60 Sekunden akkumuliert. Das verwendete Messprogramm ist im Anhang (Kap. 8.1.2) zusammengestellt.

Nach der Transformation in die Frequenzdomäne wird zuerst eine automatische Korrektur der Basislinie vorgenommen, an die sich eine automatische Phasenkorrektur anschließt, bevor die Signale für die weitere Auswertung integriert werden.

3.3 Ergebnisse

Im folgenden Kapitel werden an ausgewählten Beispielen sowohl die Auswertung und Interpretation von ^{13}C -Spektren als auch die Bestimmung der konzentra-

tionsabhängigen Pseudogleichgewichtskonstanten K_x erläutert. Als Beispiele wurden ein kurzkettiger, aliphatischer Aldehyd (Acetaldehyd) mit Methanol, ein langkettiger, aliphatischer Aldehyd (Decanal) mit Ethanol und ein aromatischer Aldehyd (2-Chlorbenzaldehyd) mit 1-Propanol ausgewählt. Die vollständigen Messergebnisse sind im Anhang (Kap. 8.1) zu finden.

3.3.1 Auswertung und Interpretation der Spektren

Aus den Spektren der reinen Stoffe sind die chemischen Verschiebungen der Signale der Aldehyde und Alkohole bekannt. Aus der Anzahl und der Position der „neuen“ Signale in den Mischungen aus Aldehyd und Alkohol (im Vergleich zu den Reinstoffspektren) lassen sich die gebildeten Produkte und damit auch die ablaufenden Reaktionen bestimmen. Um den Umsatz der Reaktionen zu ermitteln, werden die Signale integriert und mit den so gewonnenen Informationen die Gleichgewichtskonstante K_x berechnet.

Die Abbildung 3.5 zeigt das ^{13}C -Spektrum einer Mischung aus 49,8 Mol% Acetaldehyd und 50,2 Mol% Methanol bei 295 K. Im Spektrum sind neben sechs großen Hauptsignalen (Peaks 1 - 6) noch weitere kleinere Nebensignale (Peaks 7 - 18) zu sehen. Da die Lage der Signale der Ausgangsstoffe bekannt ist, können die Signale der nichtumgesetzten Edukte leicht bestimmt werden: Die Signale bei $\delta \approx 200$ und $\delta \approx 30$ resultieren von nichtumgesetztem Acetaldehyd (vgl. Abbildung 3.2); das Signal bei $\delta \approx 50$ von nichtumgesetztem Methanol. Die verbleibenden drei Hauptsignale (Peaks 4 - 6) und die kleineren Nebensignale sind Signale von Produkten, die sich durch ablaufende Reaktionen gebildet haben. Mit Hilfe der chemischen Verschiebungen der weiteren Hauptsignale kann dieses Produkt als das Halbacetal von Acetaldehyd und Methanol identifiziert werden. Für die Identifikation der Halbacetale ist Signal 4 bei $\delta \approx 98$ charakteristisch, da dieses Signal von einem C-Atom aus einer funktionellen Gruppe stammt, die in den Reinstoffspektren der Edukte nicht zu beobachten ist (vgl. Abbildung 3.6). Peak 5 bei $\delta \approx 54$ wird von dem C-Atom aus der OCH_3 -Gruppe, Peak 6 bei $\delta \approx 24$ von dem C-Atom aus der CH_3 -Gruppe verursacht. Die weitere Analyse des Spektrums zeigt, dass die verbleibenden Nebensignale von zwei Polymeren des Halbacetals stammen. Diese Annahme wird sowohl durch die Signale im Spektrum, als auch mit Hilfe der Stoffmengenbilanz belegt.

Zur Vereinfachung wird folgende Nomenklatur eingeführt: Das Halbacetal, das aus einem Aldehyd und einem Alkohol entsteht, wird als Halbacetal 1 (HA 1), das nächsthöhere Halbacetal als Halbacetal 2 (HA 2) und das folgende als Halbacetal 3 (HA 3) bezeichnet. Höhere Polymere als das Halbacetal 3 konnten in den ^{13}C -Spektren nicht identifiziert werden.

Bei der Integration der Signalflächen wird ein Signal als Bezugsgröße verwendet. Die Flächen der anderen Signale sind relativ zu diesem Bezugssignal. Da sich bei der Auswahl des Bezugssignals sowohl das Aldehydsignal aus der Aldehydgruppe als auch das Alkoholsignal aus der HOCH_x -Gruppe anbieten, wird jedes Spektrum zwei Mal ausgewertet. Bei den Mischungen aus 50 Mol% Aldehyd und 50 Mol% Alkohol stimmen die beiden Ergebnisse für die Pseudogleichgewichtskonstanten gut überein; bei den Mischungen, in denen Aldehyd- bzw. Alkoholüberschuss vor-

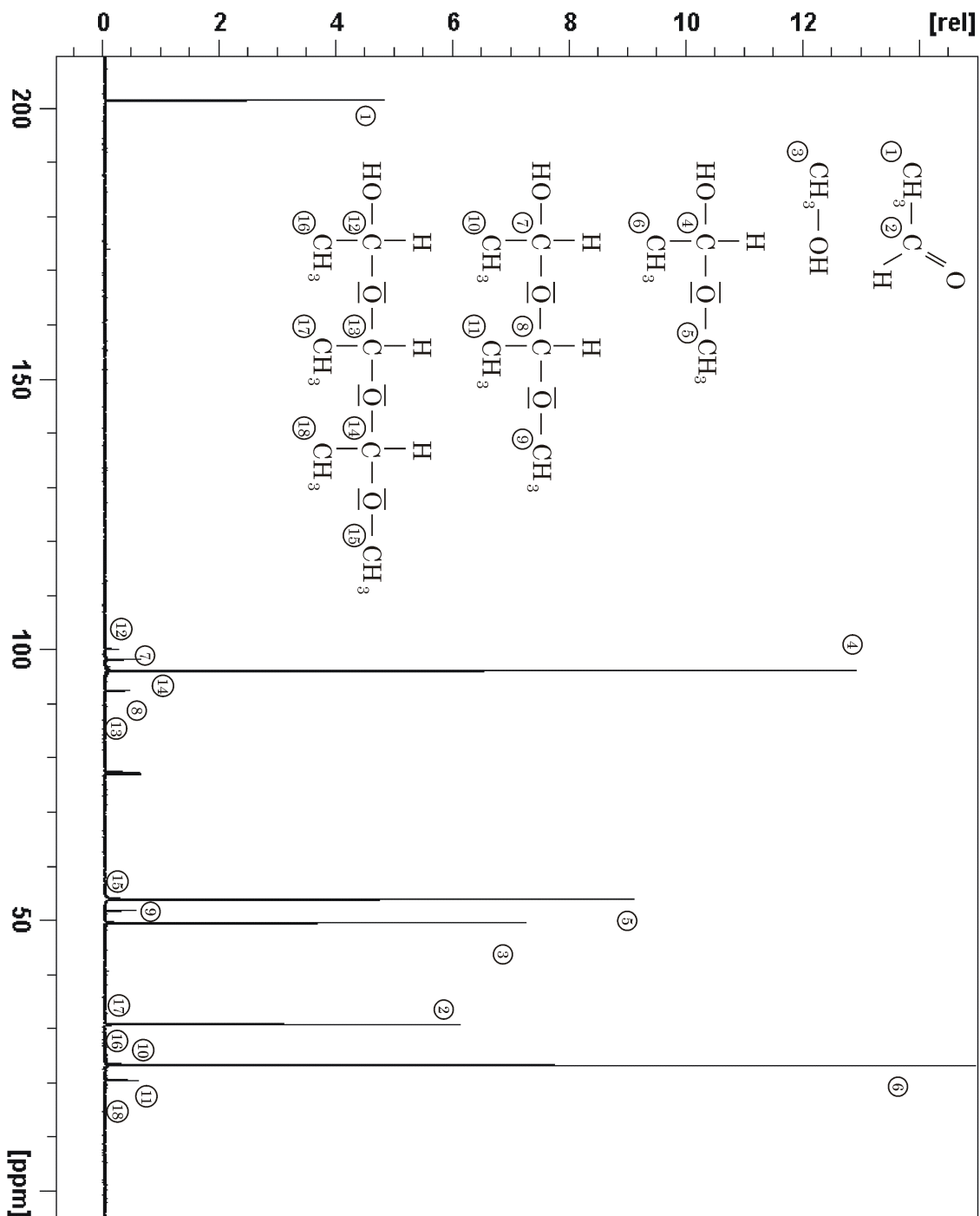


Abbildung 3.5: ^{13}C -Spektrum (49,8 Mol% Acetaldehyd + 50,2 Mol% Methanol) bei 295 K

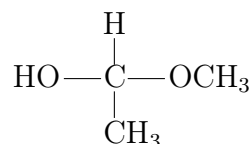


Abbildung 3.6: Strukturformel des Halbacetals aus Acetaldehyd und Methanol

Tabelle 3.1: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,8 Mol% Acetaldehyd und 50,2 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Acetaldehyd

| Acetaldehyd | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|-------------------|----------|-------------|-----------|-----------------|-----------|------------------|-----------|--|
| A_A | \bar{A}_A | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,995 \pm 0,005$ | 1,094 | 1,094 | 2,475 | $2,62 \pm 0,15$ | 0,096 | $0,095 \pm 0,01$ | 0,038 | $0,035 \pm \begin{smallmatrix} 0,005 \\ 0,003 \end{smallmatrix}$ |
| 0,990 | | | | 2,768 | | 0,087 | | 0,040 | |
| | | | | | | 0,086 | | 0,064 | |
| | | | | | | 0,105 | | 0,033 | |
| | | | | | | 0,101 | | | |

liegt, sind größere Abweichungen zu beobachten, wobei jeweils eine der beiden Auswertungen ein zuverlässigeres Ergebnis liefert.

Da chemisch äquivalente Kerne gleich abgeschirmt werden, liefern sie im NMR-Spektrum die gleichen Resonanzsignale. Deshalb sind nicht alle Signale der Halbacetale getrennt zu erkennen, da sich die Signale zum Teil überlagern, wodurch die Auswertung der Spektren erschwert wird. Die von Acetaldehyd, Methanol und HA 2 verursachten Signale sind im ^{13}C -Spektrum (vgl. Abbildung 3.5) eindeutig zuzuordnen. Die Signale von HA 1 und HA 3 überlagern sich teilweise.

In den Tabellen 3.1 und 3.2 sind sowohl die Peakflächen A der einzelnen Komponenten als auch deren Mittelwerte \bar{A} (die für die Berechnung der Molanteile verwendet wurden) mit den absoluten Abweichungen vom Mittelwert zusammengestellt. Die Subscripts sind die Abkürzungen der einzelnen Komponenten: \bar{A}_A ist beispielsweise die gemittelte Peakfläche von Acetaldehyd.

Stoffe, die mehr als ein C-Atom enthalten, bewirken im ^{13}C -Spektrum mehrere Signale, entsprechend der Anzahl ihrer C-Atome. Obwohl HA 1 drei C-Atome besitzt

Tabelle 3.2: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,8 Mol% Acetaldehyd und 50,2 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Acetaldehyd | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|-------------------|----------|-------------|-----------|-----------------|-----------|------------------|-----------|--|
| A_A | \bar{A}_A | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,845 | $0,847 \pm 0,003$ | 1,0 | 1,0 | 2,089 | $2,23 \pm 0,14$ | 0,083 | $0,083 \pm 0,01$ | 0,032 | $0,033 \pm \begin{smallmatrix} 0,005 \\ 0,003 \end{smallmatrix}$ |
| 0,850 | | | | 2,362 | | 0,075 | | 0,034 | |
| | | | | | | 0,073 | | 0,060 | |
| | | | | | | 0,095 | | 0,037 | |
| | | | | | | 0,091 | | | |

und damit im ^{13}C -Spektrum drei Signale liefert, sind in den Tabellen 3.1 und 3.2 nur zwei Signalfächen enthalten. Dies liegt daran, dass sich das Signal bei $\delta \approx 98$ aus dem Signal von HA 1 (Signal 4) und HA 3 (Signal 14) zusammensetzt und daher für die Auswertung nicht verwendet werden kann. Von HA 3 sind in diesem Spektrum nur fünf der entstehenden sieben Signale für die Auswertung verwendbar und in die Tabellen aufgenommen. Die aus der Überlagerung der Signale entstehenden Probleme bei der Auswertung von Spektren werden mit zunehmender Kettenlänge der untersuchten Stoffe immer größer.

Durch Ungenauigkeiten sowohl bei der NMR-Messung als auch bei der Integration der Signale liefern die C-Atome einer Komponente nicht exakt dieselben Werte für die Peakflächen. So liefern z. B. in Tabelle 3.1 die beiden C-Atome im Acetaldehyd die Peakflächen 1,0 und 0,990. Da für die Berechnung der Konzentrationen genau ein Molanteil für jede Komponente benötigt wird, werden die Signale gemittelt.

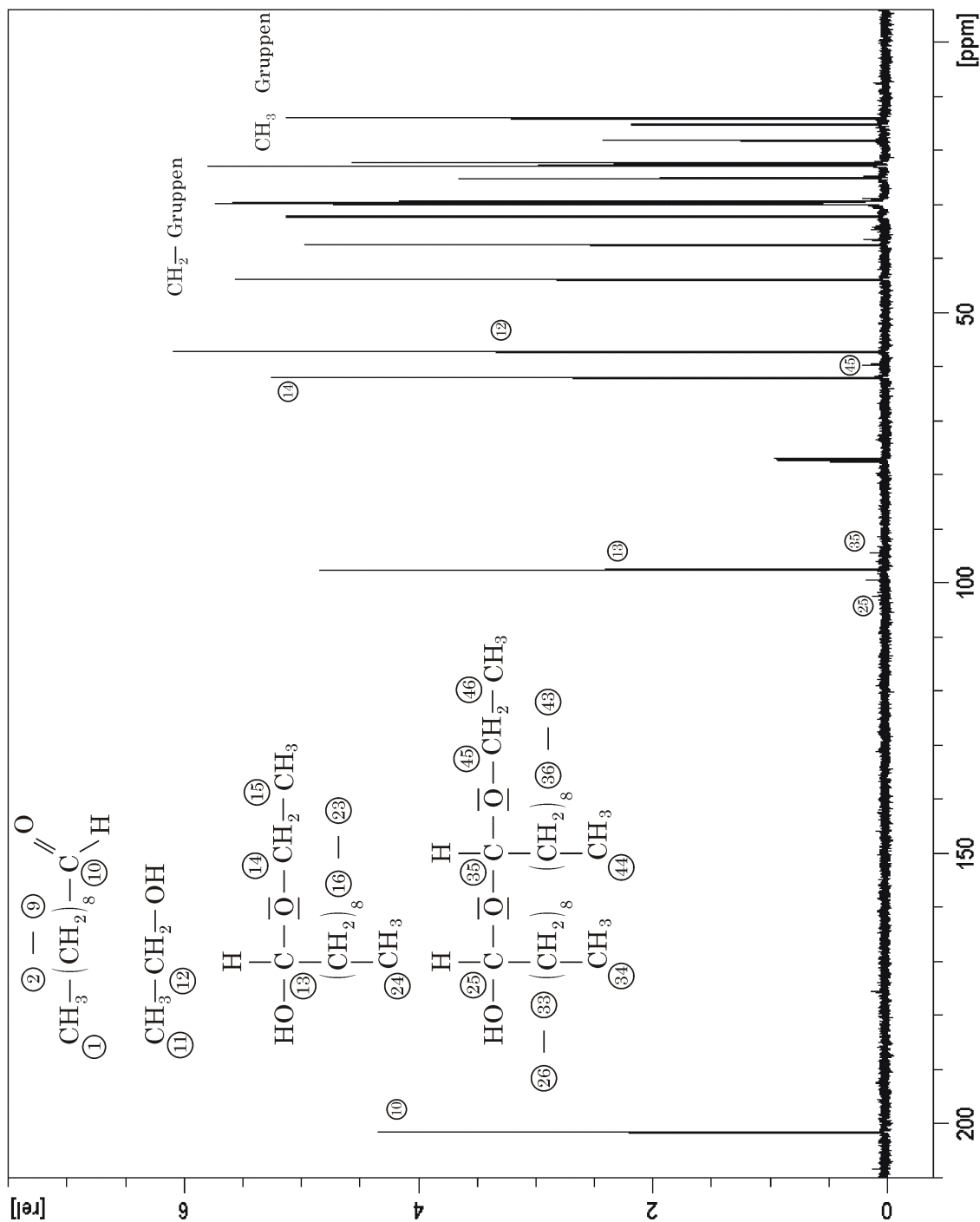
Es ist schwierig, generelle Aussagen über die Genauigkeit von NMR-Messungen zu treffen, da diese von Probenkonsistenz und -konzentration sowie experimentellen Parametern bei der Aufnahme entscheidend beeinflusst wird.

Um eine Aussage über die Größe der Fehler in den durchgeführten NMR-Messungen, bzw. deren Auswertung (Integration), treffen zu können, sind in den Tabellen 3.1 und 3.2 die absoluten Abweichungen der Einzelsignale einer Komponente vom Mittelwert angegeben. Diese betragen für Acetaldehyd $\pm 0,005$, für HA 1 $\pm 0,15$, für HA 2 $\pm 0,01$ und für HA 3 $\pm_{0,003}^{0,005}$. Die absoluten Abweichungen für die zweite Auswertung mit Methanol als Bezugsgröße liefern (wie erwartet) annähernd die gleichen Werte: Acetaldehyd $\pm 0,003$, für HA 1 $\pm 0,14$, für HA 2 $\pm 0,01$ und für HA 3 $\pm_{0,003}^{0,005}$.

Die Hauptkomponenten Acetaldehyd und HA 1 besitzen für die Auswertung mit der Bezugsgröße Acetaldehyd eine relative Abweichung von 0,5 % bzw. 5,6 %. Für die Folgeprodukte HA 2 und HA 3 wird eine Abweichung von 10,6 % bzw. 14,3 % berechnet. Die Auswertung mit Methanol als Bezugsgröße liefert die relativen Abweichungen von 0,5 % für Acetaldehyd, 6,1 % für HA 1 und 13,9 % bzw. 14,3 % für HA 2 und HA 3.

Diese Ergebnisse bestätigen, dass die Hauptkomponenten einer Lösung mit deutlich größerer Genauigkeit nachgewiesen werden können als die Nebenkomponten. Um den Fehler bei der Integration, bzw. der Wahl der Integrationsgrenzen, abschätzen zu können, werden, beispielhaft für alle untersuchten Systeme, für das System aus Acetaldehyd und Methanol mit der Bezugsgröße Acetaldehyd zwei weitere Integrationen durchgeführt. Die Tabellen 3.3 und 3.4 zeigen die zweite bzw. die dritte Integration des NMR-Spektrums der Mischung aus 49,8 Mol % Acetaldehyd und 50,2 Mol % Methanol mit der Bezugsgröße Acetaldehyd. Die Unterschiede, die sich durch die verschiedenen Integrationsvorgänge ergeben, sind gering und in den meisten Fällen deutlich kleiner als die Abweichungen der einzelnen Peakflächen zum Mittelwert.

Die Abbildung 3.7 zeigt das vollständige ^{13}C -Spektrum (und die Abbildung 3.8 einen Ausschnitt) der Mischung aus 50,0 Mol % Decanal und 50,0 Mol % Ethanol bei 295 K. Decanal ist der langkettigste, aliphatische Aldehyd, der in der vorliegenden Arbeit untersucht wurde. Aus der Analyse dieses Spektrums (vgl. Abbildung 3.7) können die Reaktionen eindeutig identifiziert werden. Die Auswertung des Spek-

Abbildung 3.7: ^{13}C -Spektrum der Mischung der Mischung 50,0 Mol% Decanal + 50,0 Mol% Ethanol bei 295 K

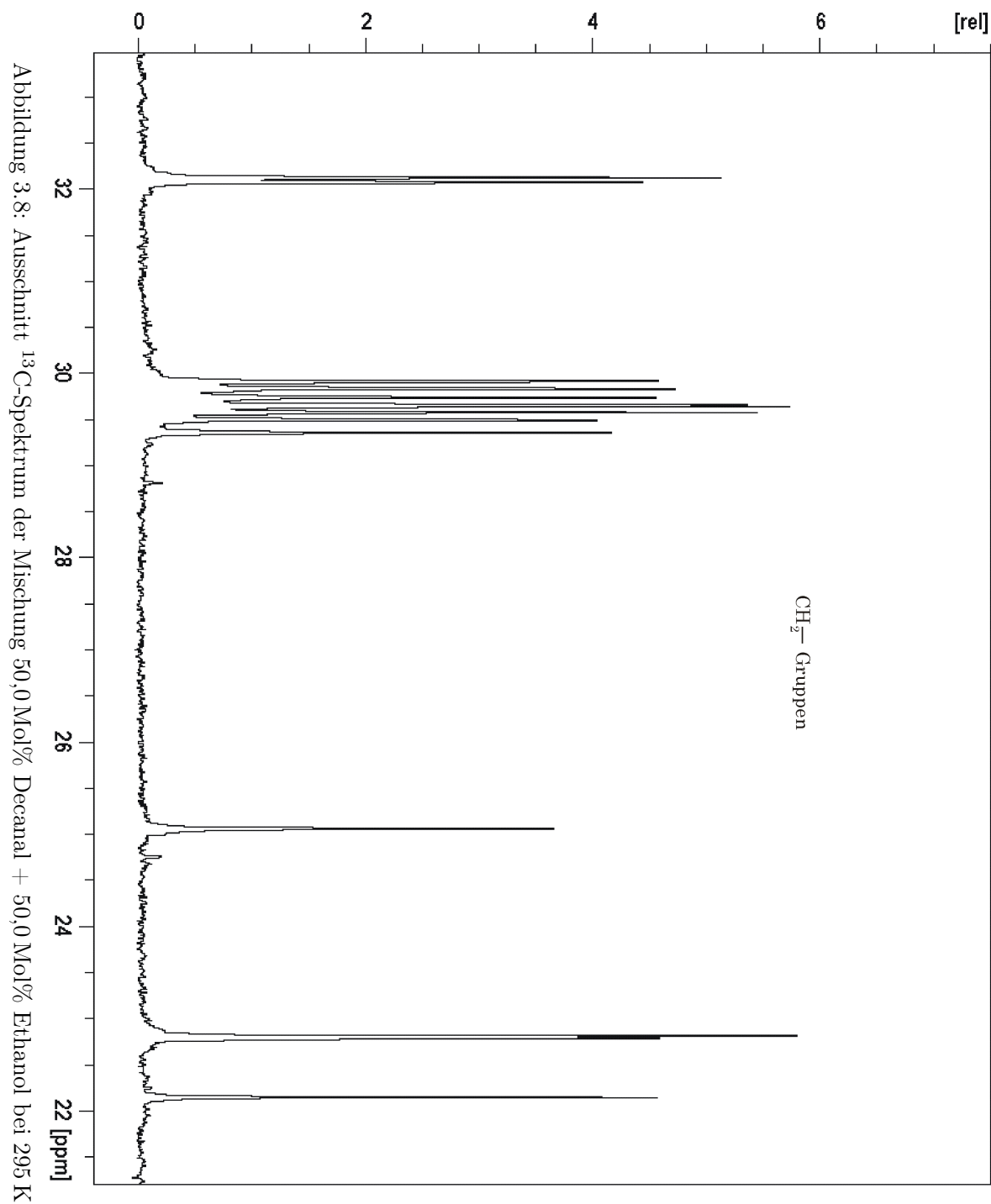


Tabelle 3.3: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,8 Mol% Acetaldehyd und 50,2 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Acetaldehyd, 2. Integration

| Acetaldehyd | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|------------------|----------|-------------|-----------|------------------|-----------|------------------|-----------|------------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,978 \pm 0,02$ | 1,064 | 1,064 | 2,453 | $2,546 \pm 0,09$ | 0,090 | $0,100 \pm 0,01$ | 0,041 | $0,037 \pm 0,01$ |
| 0,956 | | | | | | 0,091 | | 0,041 | |
| | | | | | | 0,100 | | 0,055 | |
| | | | | | | 0,112 | | 0,046 | |
| | | | | | | 0,108 | | | |

Tabelle 3.4: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,8 Mol% Acetaldehyd und 50,2 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Acetaldehyd, 3. Integration

| Acetaldehyd | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|------------------|----------|-------------|-----------|------------------|-----------|------------------|-----------|------------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,977 \pm 0,02$ | 1,063 | 1,063 | 2,457 | $2,550 \pm 0,09$ | 0,092 | $0,102 \pm 0,01$ | 0,041 | $0,037 \pm 0,01$ |
| 0,953 | | | | | | 0,095 | | 0,044 | |
| | | | | | | 0,098 | | 0,055 | |
| | | | | | | 0,114 | | 0,047 | |
| | | | | | | 0,111 | | | |

trums wird dadurch erschwert, dass die meisten der C-Atome in chemisch äquivalenten Gruppen (CH_2 -Gruppen) gebunden sind. Die Signale der CH_2 -Gruppen liegen alle im Bereich von $\delta \approx 22$ bis $\delta \approx 32$. Wie in der Abbildung 3.8 zu sehen ist, überlagern sich diese Signale und können für die Auswertung nicht verwendet werden, da eine zuverlässige Integration nicht möglich ist.

Das Signal der Aldehydgruppe des nichtumgesetzten Decanals (Peak 10) ist leicht zu identifizieren, da die Aldehydsignale in einem anderen Bereich als die Signale der weiteren funktionellen Gruppen liegen. Die Signale des nichtumgesetzten Ethanol bei $\delta \approx 58$ (CH_2OH -Gruppe, Peak 12) und $\delta \approx 18$ (CH_3 -Gruppe, Peak 11) lassen sich ebenfalls zweifelsfrei zuordnen. Auch die charakteristischen Signale um $\delta \approx 98$, die auf die Bildung der Halbacetale schließen lassen, sind eindeutig zu erkennen. Allerdings lässt sich im Spektrum für diese Mischung nur die Bildung von Halbacetal 1 und Halbacetal 2 nachweisen - Signale für ein Halbacetal 3 sind nicht zu erkennen.

Die Tabellen 3.5 und 3.6 enthalten die Signalflächen A sowie deren Mittelwerte, die für die Berechnung der Molanteile verwendet werden, und die absoluten Abweichungen vom Mittelwert. Ethanol ist die einzige Komponente, der alle Signale eindeutig zugeordnet werden können. Für alle anderen Komponenten können nur drei Signale zuverlässig ausgewertet werden.

Die absoluten Abweichungen vom Mittelwert der Peakflächen liegen für beide Auswertungen dicht beieinander. Für Decanal beträgt die absolute Abweichung bis zu $\pm_{0,04}^{0,02}$, für Ethanol $\pm 0,01$, für HA 1 bis zu $\pm 0,02$ und für HA 2 $\pm_{0,007}^{0,009}$. Die relative Abweichung für Decanal ist kleiner als 4 %, für Ethanol etwa 1 %, für HA 1 etwa 2 % und für HA 2 etwa 30 %.

Tabelle 3.5: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 50,0 Mol% Decanal und 50,0 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Decanal

| Decanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|---------|---------------------------|---------|------------------|-----------|---------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,000 | $0,983 \pm_{0,04}^{0,02}$ | 1,040 | $1,027 \pm 0,01$ | 1,015 | $1,021 \pm_{0,01}^{0,02}$ | 0,038 | $0,029 \pm_{0,007}^{0,009}$ |
| 0,946 | | 1,013 | | 1,041 | | 0,022 | |
| 1,003 | | | | 1,008 | | 0,026 | |

Tabelle 3.6: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 50,0 Mol% Decanal und 50,0 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

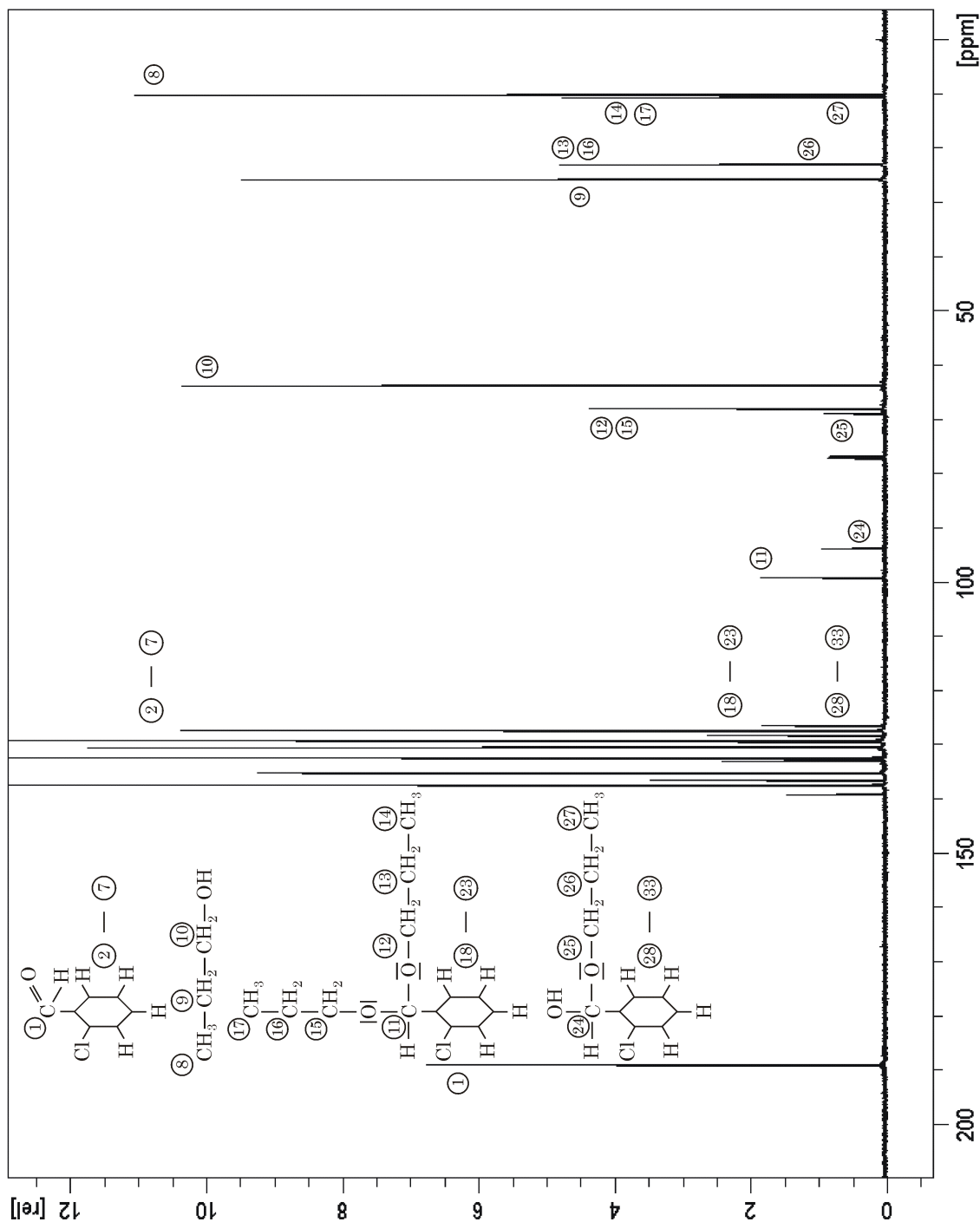
| Decanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|---------|----------------------------|---------|-------------------|-----------|------------------|-----------|-----------------------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 0,977 | $0,9668 \pm_{0,03}^{0,02}$ | 1,0 | $0,996 \pm 0,005$ | 1,008 | $1,012 \pm 0,02$ | 0,038 | $0,029 \pm_{0,007}^{0,009}$ |
| 0,934 | | 0,991 | | 1,031 | | 0,022 | |
| 0,989 | | | | 0,997 | | 0,026 | |

Die Abbildung 3.9 zeigt ein ^{13}C -Spektrum des Gleichgewichtszustands einer äquimolaren Einsatzmischung aus 2-Chlorbenzaldehyd und 1-Propanol bei 295 K. Der aromatische Aldehyd 2-Chlorbenzaldehyd besteht aus einem Benzolring, an dem das H-Atom in ortho-Stellung zur Aldehydgruppe durch ein Chlor-Atom substituiert wurde.

Die ^{13}C -Spektren der Mischungen mit 2-Chlorbenzaldehyd unterscheiden sich auffällig von den Spektren mit aliphatischen Aldehyden: Die Analyse des Spektrums führt zu der Interpretation, dass bei der Reaktion von 2-Chlorbenzaldehyd mit 1-Propanol als Hauptreaktion die Reaktion zum Vollacetal (VA) (charakteristisch: Peak 11 bei $\delta \approx 99$) und als Nebenreaktion die Reaktion zum Halbacetal 1 (charakteristisch: Peak 24 bei $\delta \approx 94$) abläuft. Ein Vollacetal enthält zwei chemisch äquivalente Kohlenstoffketten, deren C-Atome im ^{13}C -Spektrum identische Signale liefern. Da bei der Integration für das Produkt mit dem Peak bei $\delta \approx 99$ die Signalflächen, die aus der Alkoholgruppe stammen ($\delta \approx 68$, $\delta \approx 23$ und $\delta \approx 10$) doppelt so groß sind, wie die aus der Aldehydgruppe (vgl. Tabellen 3.7 und 3.8), handelt es sich bei diesem Molekül um ein Vollacetal. Diese Annahme wurde zusätzlich mit Hilfe der Karl-Fischer-Titration untermauert, da in der Reaktionsmischung aus 2-Chlorbenzaldehyd und 1-Propanol Wasser nachgewiesen werden konnte, das bei der Bildung des Vollacetals entsteht.

Da im betrachteten ^{13}C -Spektrum alle Signale der Benzolringkohlenstoffatome im Bereich von $\delta \approx 126 - 140$ liegen und sich zum Teil überlagern (vgl. Abbildung 3.10), können nicht alle Signale für die Bestimmung der Konzentrationen integriert werden.

Die Tabellen 3.7 und 3.8 zeigen neben den Peakflächen der Komponenten auch die Mittelwerte der Peakflächen sowie deren absolute Abweichung zum Mittelwert. Für 1-Propanol können alle drei Signale, für 2-Chlorbenzaldehyd sechs Signale,

Abbildung 3.9: ^{13}C -Spektrum der Mischung der Mischung 48,4 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd + 49,6 Mol% 1-Propanol bei 295 K

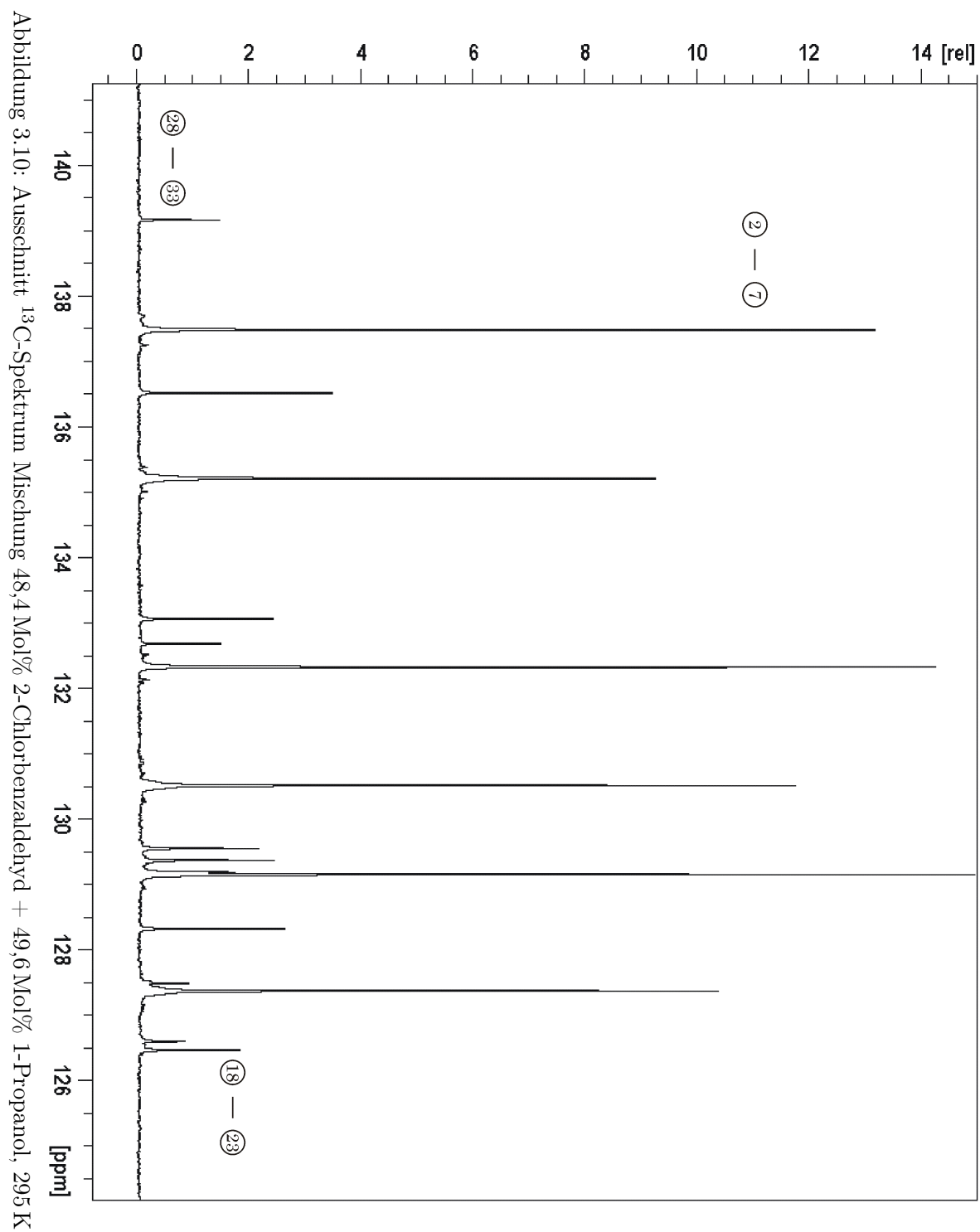


Tabelle 3.7: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,4 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 49,6 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd

| 2-Chlorbenzaldehyd | | 1-Propanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|------------------|------------|---|----------|---|-----------|--|
| A_{2-CB} | \bar{A}_{2-CB} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0000 | 1,020 \pm 0,02 | 0,7608 | 0,781 \pm ^{0,03} _{0,02} | 0,1970 | 0,185 \pm ^{0,02} _{0,01} | 0,0880 | 0,086 \pm ^{0,01} _{0,004} |
| 1,0355 | | 0,7705 | | 0,1942 | | 0,0961 | |
| 1,0297 | | 0,8111 | | 0,1863 | | 0,0838 | |
| 1,0129 | | | | 0,2008 | | 0,0822 | |
| | | | | 0,1935 | | 0,0836 | |
| | | | | 0,1726 | | 0,0817 | |
| | | | | 0,1759 | | 0,0871 | |
| | | | | 0,3551 | | | |
| | | | | 0,3596 | | | |

Tabelle 3.8: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,4 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 49,6 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| 2-Chlorbenzaldehyd | | 1-Propanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|------------------|------------|---|----------|------------------|-----------|---|
| A_{2-CB} | \bar{A}_{2-CB} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,3194 | 1,336 \pm 0,02 | 1,0 | 1,026 \pm ^{0,04} _{0,03} | 0,2584 | 0,243 \pm 0,02 | 0,1161 | 0,114 \pm ^{0,009} _{0,006} |
| 1,3481 | | 1,0166 | | 0,2562 | | 0,1223 | |
| 1,3558 | | 1,0607 | | 0,2459 | | 0,1196 | |
| 1,3191 | | | | 0,2649 | | 0,1032 | |
| | | | | 0,2552 | | 0,1122 | |
| | | | | 0,2194 | | 0,1078 | |
| | | | | 0,227 | | 0,1150 | |
| | | | | 0,4653 | | | |
| | | | | 0,4781 | | | |

für das Vollacetal elf Signale und für das Halbacetal 1 sieben Signale ausgewertet werden.

Die absoluten Abweichungen vom Mittelwert stimmen für beide Auswertungen gut überein, die relativen Abweichungen betragen für 2-Chlorbenzaldehyd bis zu 2 %, für 1-Propanol bis zu 4 %, für das Vollacetal bis zu 8,5 % und für das Halbacetal 1 bis zu 11,5 %.

Im Allgemeinen ist bei den untersuchten Systemen die Genauigkeit in den Peakflächen für die Hauptkomponenten deutlich besser als 5 %. Die Genauigkeit der Nebekomponenten ist deutlich schlechter. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die Signale dieser Komponenten meist sehr klein sind und dadurch der Fehler bei der Integration relativ groß wird. Die Genauigkeit der Peakflächen beeinflusst direkt die Genauigkeit der ermittelten Stoffmengen im Gleichgewicht, aus denen die Molanteile und damit die konzentrationsabhängigen Pseudogleichgewichtskonstanten K_x bestimmt werden. Da die Peakflächen von Aldehyd, Alkohol und Halbacetal 1

in der Regel deutlich größer sind als die von Halbacetal 2 und Halbacetal 3, ist die Genauigkeit der Zahlenwerte der Pseudogleichgewichtskonstanten $K_{x,HA1}$ größer als die von $K_{x,HA2}$ und $K_{x,HA3}$.

3.3.2 Bestimmung der Gleichgewichtskonstanten

Aus den Peakflächen der Signale können die Molzahlen der in der Probe enthaltenen Komponenten im chemischen Gleichgewicht bestimmt werden. Dabei werden folgende Beziehungen verwendet:

Die gemittelte Peakfläche \bar{A} ist proportional zur Molzahl n der Atomkerne der betrachteten Komponente i .

$$\bar{A}_i = k_i \cdot n_i \quad (3.11)$$

Da üblicherweise angenommen wird, dass die Proportionalitätskonstanten k_i für alle Signale gleich groß sind, kann $k_i = 1$ gesetzt werden:

$$\bar{A}_i = n_i \quad (3.12)$$

Für die Stoffbilanzen der Edukte gilt:

Die Molzahl des eingewogenen Aldehyds ist gleich der Summe der Molzahlen des nichtumgesetzten Aldehyds und des zu Produkten umgesetzten Aldehyds:

$$n_{Aldehyd}^0 = n_{Aldehyd} + \sum_i^l i \cdot n_{HAi} + n_{VA} \quad l = 1, 2, 3 \quad (3.13)$$

Da in den untersuchten Mischungen maximal drei Produkte identifiziert wurden, kann l maximal den Wert drei annehmen.

Die Molzahl des eingewogenen Alkohols ist gleich der Summe der Molzahlen des nichtumgesetzten und des zu Produkten umgesetzten Alkohols:

$$n_{Alkohol}^0 = n_{Alkohol} + \sum_i^l n_{HAi} + 2 \cdot n_{VA} \quad l = 1, 2, 3 \quad (3.14)$$

Wird das Aldehydsignal als Bezugsgröße verwendet, werden die Stoffmengen mit Hilfe von Gleichung 3.13 berechnet:

$$\frac{n_{Aldehyd}^0}{n_{Aldehyd}} = 1 + \frac{n_{HA1}}{n_{Aldehyd}} + \frac{2 \cdot n_{HA2}}{n_{Aldehyd}} + \frac{3 \cdot n_{HA3}}{n_{Aldehyd}} + \frac{n_{VA}}{n_{Aldehyd}} \quad (3.15)$$

$$\frac{n_{Aldehyd}^0}{n_{Aldehyd}} = 1 + \frac{\bar{A}_{HA1}}{\bar{A}_{Aldehyd}} + \frac{2 \cdot \bar{A}_{HA2}}{\bar{A}_{Aldehyd}} + \frac{3 \cdot \bar{A}_{HA3}}{\bar{A}_{Aldehyd}} + \frac{\bar{A}_{VA}}{\bar{A}_{Aldehyd}} \quad (3.16)$$

Für die Stoffmengen der einzelnen Komponenten gilt:

$$n_{Aldehyd} = \frac{n_{Aldehyd}^0}{1 + \frac{\bar{A}_{HA1}}{\bar{A}_{Aldehyd}} + \frac{2 \cdot \bar{A}_{HA2}}{\bar{A}_{Aldehyd}} + \frac{3 \cdot \bar{A}_{HA3}}{\bar{A}_{Aldehyd}} + \frac{\bar{A}_{VA}}{\bar{A}_{Aldehyd}}} \quad (3.17)$$

$$n_{HA1} = n_{Aldehyd} \cdot \frac{\bar{A}_{HA1}}{\bar{A}_{Aldehyd}} \quad (3.18)$$

$$n_{HA2} = n_{Aldehyd} \cdot \frac{\bar{A}_{HA2}}{\bar{A}_{Aldehyd}} \quad (3.19)$$

$$n_{HA3} = n_{Aldehyd} \cdot \frac{\bar{A}_{HA3}}{\bar{A}_{Aldehyd}} \quad (3.20)$$

$$n_{VA} = n_{Aldehyd} \cdot \frac{\bar{A}_{VA}}{\bar{A}_{Aldehyd}} \quad (3.21)$$

$$n_{Alkohol} = n_{Alkohol}^0 - n_{HA1} - n_{HA2} - n_{HA3} - 2 \cdot n_{VA} \quad (3.22)$$

Wird als Bezugsgröße das Alkoholsignal ausgewählt, werden die Stoffmengen aus Gleichung 3.14 berechnet:

$$\frac{n_{Alkohol}^0}{n_{Alkohol}} = 1 + \frac{n_{HA1}}{n_{Alkohol}} + \frac{n_{HA2}}{n_{Alkohol}} + \frac{n_{HA3}}{n_{Alkohol}} + \frac{2 \cdot n_{VA}}{n_{Alkohol}} \quad (3.23)$$

$$\frac{n_{Alkohol}^0}{n_{Alkohol}} = 1 + \frac{\bar{A}_{HA1}}{\bar{A}_{Alkohol}} + \frac{\bar{A}_{HA2}}{\bar{A}_{Alkohol}} + \frac{\bar{A}_{HA3}}{\bar{A}_{Alkohol}} + \frac{2 \cdot \bar{A}_{VA}}{\bar{A}_{Alkohol}} \quad (3.24)$$

Für die Stoffmengen der einzelnen Komponenten gilt:

$$n_{Alkohol} = \frac{n_{Alkohol}^0}{1 + \frac{\bar{A}_{HA1}}{\bar{A}_{Alkohol}} + \frac{2 \cdot \bar{A}_{HA2}}{\bar{A}_{Alkohol}} + \frac{3 \cdot \bar{A}_{HA3}}{\bar{A}_{Alkohol}} + \frac{\bar{A}_{VA}}{\bar{A}_{Alkohol}}} \quad (3.25)$$

$$n_{HA1} = n_{Alkohol} \cdot \frac{\bar{A}_{HA1}}{\bar{A}_{Alkohol}} \quad (3.26)$$

$$n_{HA2} = n_{Alkohol} \cdot \frac{\bar{A}_{HA2}}{\bar{A}_{Alkohol}} \quad (3.27)$$

$$n_{HA3} = n_{Alkohol} \cdot \frac{\bar{A}_{HA3}}{\bar{A}_{Alkohol}} \quad (3.28)$$

$$n_{VA} = n_{Alkohol} \cdot \frac{\bar{A}_{VA}}{\bar{A}_{Alkohol}} \quad (3.29)$$

$$n_{Aldehyd} = n_{Aldehyd}^0 - n_{HA1} - 2 \cdot n_{HA2} - 3 \cdot n_{HA3} - n_{VA} \quad (3.30)$$

Die Umrechnung der Molzahlen auf die Molanteile x_i erfolgt mit Gleichung 3.31:

$$x_i = \frac{n_i}{n_{ges}} \quad (3.31)$$

mit

$$n_{ges} = n_{Aldehyd} + n_{Alkohol} + \sum_i^3 n_{HAi} + n_{VA} + n_W \quad (3.32)$$

Da man aus den ^{13}C -Spektren keine Informationen über die Molzahl von Wasser erhalten kann, wird diese über die Molzahl des Vollacetals bestimmt. Bei der Reaktion zum Vollacetal gilt, dass sich genauso viel Wasser abspaltet, wie sich Vollacetal bildet:

$$n_W = n_{VA} \quad (3.33)$$

Mit den Molanteilen x_i werden die konzentrationsabhängigen Pseudogleichgewichtskonstanten $K_{x,i}$ bestimmt.

Für die Hauptreaktion - die Bildung von Halbacetal 1 - ergibt sich für die Gleichgewichtskonstante $K_{x,HA1}$:

$$K_{x,HA1} = \frac{x_{HA1}}{x_{Aldehyd} \cdot x_{Alkohol}} \quad (3.34)$$

Für die zusätzlich ablaufenden Folgereaktionen zu Halbacetal 2 bzw. Halbacetal 3 kann das Reaktionsgleichgewicht folgendermaßen beschrieben werden:

$$K_{x,HAn} = \frac{x_{HAn} \cdot x_{Alkohol}}{x_{HA1} \cdot x_{HA(n-1)}} \quad n = 2, 3 \quad (3.35)$$

Für die Bildung des Vollacetals (vgl. Systeme mit 2-Chlorbenzaldehyd) ergibt sich für die Gleichgewichtskonstante $K_{x,VA}$:

$$K_{x,VA} = \frac{x_{VA} \cdot x_{H_2O}}{x_{HA1} \cdot x_{Alkohol}} \quad (3.36)$$

In den folgenden Tabellen sind die Molanteile und konzentrationsabhängigen Pseudogleichgewichtskonstanten der beschriebenen Beispiele angegeben. Für die Mischung aus 49,8 Mol% Acetaldehyd und 50,2 Mol% Methanol sind die Ergebnisse in der Tabelle 3.9, für die Mischung aus 50,0 Mol% Decanal und 50,0 Mol% Ethanol in der Tabelle 3.10 und für die Mischung aus 48,4 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 49,6 Mol% 1-Propanol in der Tabelle 3.11 zusammengefasst.

Tabelle 3.9: Molanteile und $K_{x,i}$ der Mischung aus 49,8 Mol% Acetaldehyd und 50,2 Mol% Methanol bei $T = 295$ K

| Bezug | n_A^0 | n_M^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_A/n_M$ |
|-------|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| A | 49,8 | 50,2 | 0,202 | 0,242 | 0,530 | 0,019 | 0,007 | 10,84 | 0,017 | 0,168 | -8,1 |
| M | 49,8 | 50,2 | 0,198 | 0,240 | 0,534 | 0,020 | 0,008 | 11,24 | 0,017 | 0,177 | -2,7 |

Tabelle 3.10: Molanteile und $K_{x,i}$ der Mischung aus 50,0 Mol% Decanal und 50,0 Mol% Ethanol bei $T = 295$ K

| Bezug | n_D^0 | n_E^0 | x_D | x_E | x_{HA1} | x_{HA2} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $\Delta n_D/n_E$ |
|-------|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-------------|-------------|------------------|
| D | 50,0 | 50,0 | 0,323 | 0,332 | 0,335 | 0,010 | 3,13 | 0,028 | -1,42 |
| E | 50,0 | 50,0 | 0,322 | 0,332 | 0,337 | 0,010 | 3,16 | 0,028 | -0,01 |

Tabelle 3.11: Molanteile und $K_{x,i}$ der Mischung aus 48,6 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 49,4 Mol% 1-Propanol bei $T = 295$ K

| Bezug | n_{2-C}^0 | n_{1-P}^0 | x_{2-CB} | x_{1-P} | x_{HA1} | x_{VA} | x_W | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,VA}$ | $\Delta n_{2-C}/n_{1-P}$ |
|-------|-------------|-------------|------------|-----------|-----------|----------|-------|-------------|------------|--------------------------|
| 2-C | 48,6 | 49,4 | 0,437 | 0,367 | 0,037 | 0,079 | 0,079 | 0,230 | 0,465 | -8,8 |
| 1-P | 48,6 | 49,4 | 0,433 | 0,358 | 0,040 | 0,085 | 0,085 | 0,256 | 0,505 | -7,0 |

Um die Genauigkeit der NMR-Ergebnisse einordnen zu können, ist neben den ermittelten Molanteilen und Pseudogleichgewichtskonstanten auch der relative Fehler in den Molzahlen $\Delta n_{Ald}/n_{Alk}$ angegeben. Dieser wird durch die Gleichung 3.37 beschrieben:

$$\Delta n_{Ald}/n_{Alk} = \frac{(n_{Ald}/n_{Alk})_{ber} - (n_{Ald}/n_{Alk})_{exp}}{(n_{Ald}/n_{Alk})_{exp}} \quad (3.37)$$

Es wird die Differenz aus dem Quotienten der in Abhängigkeit von der Ausgangsmischung und ablaufenden Reaktionen berechneten Molzahlen von Aldehyd und

Alkohol und dem Quotienten der aus dem Experiment bestimmten Molzahlen von Aldehyd und Alkohol gebildet und durch die im Experiment bestimmten Molzahlen geteilt. In diesem Term sind sowohl die Ungenauigkeiten bei der Einwaage der Stoffe als auch des NMR-Experiments und der Integration enthalten. So wie in den hier gezeigten Beispielen liegt der relative Fehler in den Molzahlen für die äquimolaren Einsatzmischungen im Allgemeinen deutlich unter 10%. Für die nicht-äquimolaren Einsatzmischungen werden z.T. auch deutlich höhere Werte erreicht (vgl. auch Kap. 8.1.4).

Für alle drei untersuchten Systeme stimmen für die Mischungen aus 50 Mol% Aldehyd und 50 Mol% Alkohol die aus den beiden unterschiedlichen Auswertungen (d. h. unterschiedliche Bezugsgrößen) erhaltenen Zahlenwerte sowohl für die Molanteile als auch für die Pseudogleichgewichtskonstanten gut überein. Für die Gleichgewichtskonstante $K_{x,HA1}$ betragen beispielsweise die relativen Abweichungen in den beiden Auswertungen für die Mischung aus 49,8 Mol% Acetaldehyd und 50,2 Mol% Methanol 3,7%, für die Mischung aus 50,0 Mol% Decanal und 50,0 Mol% Ethanol etwa 1% und für die Mischung aus 48,6 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 49,4 Mol% 1-Propanol 10%.

Die Tabelle 3.12 gibt einen Überblick über die Pseudogleichgewichtskonstanten $K_{x,HA1}$ für alle untersuchten Systeme bei $T = 295\text{ K}$ für äquimolare Einsatzmischungen aus Aldehyd und Alkohol.

Da durch die zwei Bezugsgrößen für jedes System zwei Zahlenwerte der Pseudogleichgewichtskonstanten zur Verfügung stehen, wurde in der Tabelle 3.12 der Wert der Auswertung mit dem kleineren relativen Fehler in den Molzahlen ausgewählt.

Tabelle 3.12: $K_{x,HA1}$ und in Klammern die relative Abweichung in den Molzahlen (Δn) der untersuchten Systeme mit der Konzentration von etwa 50 Mol% Aldehyd und 50 Mol% Alkohol bei $T = 295\text{ K}$

| | Acet- aldehyd | Propanal | Butanal | Heptanal | Decanal | 3-Phenyl- propanal | 2-Chlor- benzaldehyd |
|------------|------------------|-----------------|----------------|----------------|-----------------|-----------------------|-------------------------|
| Methanol | 11,24 (-2,7) | 9,25 (5,6) | 7,18 (-0,8) | 7,06 (-2,8) | 6,37 (18,5) | 8,68 (15,5) | 0,597 (-17,0) |
| Ethanol | 4,70 (-12,6) | 4,35 (-13,2) | 3,00 (0,01) | 3,19 (6,3) | 3,16 (-0,01) | 3,97 (12,3) | 0,266 (-8,2) |
| 1-Propanol | 4,56 (-7,3) | 4,15 (14,5) | 3,22 (5,5) | 3,22 (14,7) | 3,13 (4,1) | 3,84 (10,8) | 0,256 (-7,0) |

Die Gleichgewichtskonstante $K_{x,HA1}$ nimmt mit steigender Alkylkettenlänge der aliphatischen Aldehyde ab. Für das System aus dem kurzkettigsten untersuchten Aldehyd Acetaldehyd und dem kleinsten Alkohol Methanol beträgt $K_{x,HA1} = 11,24$, für das System aus dem langkettigsten untersuchten Aldehyd Decanal und Methanol $K_{x,HA1} = 6,37$. Der Einfluss der Alkylkettenlänge des Aldehyds ist umso deutlicher, je kleiner die Aldehydmoleküle sind: Der Wechsel von Acetaldehyd auf Propanal (in Kombination mit Methanol) bewirkt einen Unterschied in den Zahlenwerten der Pseudogleichgewichtskonstanten von $\Delta K_{x,HA1} = 2$, der Wechsel von Heptanal auf Decanal nur noch eine Differenz von $\Delta K_{x,HA1} = 0,7$.

Die Zahlenwerte der Pseudogleichgewichtskonstanten für die Systeme mit 3-Phenylpropanal unterscheiden sich kaum von denen der Systeme mit Propanal (z. B. $K_{x,HA1} = 8,68$ bzw. $K_{x,HA1} = 9,25$ in Kombination mit Methanol). Dies zeigt, dass die Substitution eines H-Atoms am dritten C-Atom durch einen Benzolring fast keinen Einfluss auf den Wert der Pseudogleichgewichtskonstanten ausübt.

Die Systeme mit dem aromatischen Aldehyd 2-Chlorbenzaldehyd weisen im Vergleich zu allen anderen untersuchten Systemen deutlich kleinere Werte der Pseudogleichgewichtskonstanten auf.

Mit steigender Alkylkettenlänge des Alkohols nimmt der Zahlenwert der Pseudogleichgewichtskonstanten $K_{x,HA1}$ ebenfalls ab: Für die Mischung aus Acetaldehyd mit Methanol beträgt $K_{x,HA1} = 11,24$, für die Mischung aus Acetaldehyd und Ethanol $K_{x,HA1} = 4,70$ und für die Mischung aus Acetaldehyd und 1-Propanol nimmt $K_{x,HA1}$ den Wert 4,56 an. Der Einfluss der Alkylkettenlänge des Alkohols auf den Wert der Pseudogleichgewichtskonstanten zeigt sich bei allen Systemen insbesondere beim Wechsel von Methanol auf Ethanol. Der Übergang von Ethanol auf 1-Propanol hat keinen signifikanten Einfluss auf den Zahlenwert der Pseudogleichgewichtskonstanten. Für die Systeme mit Acetaldehyd beträgt beispielsweise der Unterschied im Zahlenwert beim Wechsel von Methanol auf Ethanol $\Delta K_{x,HA1} = 6,54$, beim Übergang von Ethanol auf 1-Propanol beträgt $\Delta K_{x,HA1}$ lediglich 0,14.

Um die Konzentrationsabhängigkeit der Pseudogleichgewichtskonstanten $K_{x,i}$ zu demonstrieren, sind beispielhaft für das System aus Butanal und 1-Propanol die Ergebnisse der Pseudogleichgewichtskonstanten $K_{x,i}$ für die fünf untersuchten Konzentrationen für beide Bezugsgrößen in der Tabelle 3.13 zusammengestellt.

Tabelle 3.13: $K_{x,i}$ des Systems Butanal und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295\text{ K}$ für beide Bezugsgrößen

| Bezug | n_B^0 | n_{1-P}^0 | x_B | x_{1-P} | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_B/n_{1P}$ |
|-------|---------|-------------|-------|-----------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|---------------------|
| 1-P | 20,0 | 80,0 | 0,021 | 0,755 | 0,224 | - | - | 13,96 | - | - | -69,7 |
| 1-P | 40,0 | 60,0 | 0,178 | 0,461 | 0,351 | 0,010 | - | 4,29 | 0,036 | - | -25,6 |
| 1-P | 50,0 | 50,0 | 0,318 | 0,339 | 0,327 | 0,012 | 0,004 | 3,04 | 0,038 | 0,360 | 5,9 |
| 1-P | 60,1 | 39,9 | 0,467 | 0,221 | 0,293 | 0,013 | 0,005 | 2,84 | 0,033 | 0,316 | 1,2 |
| 1-P | 80,0 | 20,0 | 0,763 | 0,071 | 0,151 | 0,010 | 0,005 | 2,81 | 0,031 | 0,232 | -4,8 |
| B | 20,0 | 80,0 | 0,055 | 0,764 | 0,181 | - | - | 4,31 | - | - | -20,0 |
| B | 40,0 | 60,0 | 0,207 | 0,480 | 0,305 | 0,008 | - | 3,07 | 0,042 | - | -15,9 |
| B | 50,0 | 50,0 | 0,313 | 0,334 | 0,337 | 0,012 | 0,004 | 3,22 | 0,036 | 0,363 | 5,5 |
| B | 60,1 | 39,9 | 0,466 | 0,220 | 0,295 | 0,013 | 0,005 | 2,88 | 0,033 | 0,303 | 1,3 |
| B | 80,0 | 20,0 | 0,764 | 0,077 | 0,145 | 0,010 | 0,005 | 2,47 | 0,035 | 0,264 | -12,0 |

Der Vergleich der relativen Abweichungen sowie der Zahlenwerte der Pseudogleichgewichtskonstanten $K_{x,HA1}$ zeigt, dass sich die Werte für die nichtäquimolaren Einsatzmischungen z. T. deutlich unterscheiden. Insbesondere für die Mischung aus 20 Mol% Butanal und 80 Mol% 1-Propanol wird in der Auswertung mit 1-Propanol als Bezugsgröße ein $K_{x,HA1}$ -Wert von 13,96 (relative Molzahlabweichung

chung -69,7 %) und mit Butanal als Bezugsgröße ein $K_{x,HA1}$ -Wert von 4,31 (relative Molzahlabweichung -20,0 %) erreicht.

Im Gegensatz dazu stimmen für die äquimolare Einsatzmischung sowohl die Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten $K_{x,HA1}$ (3,04 bzw. 3,22) als auch die relativen Abweichungen der Molzahlen (5,9 % bzw. 5,5 %) in beiden Auswertungen gut überein.

In der Tabelle 3.14 sind die Werte der Pseudogleichgewichtskonstanten für die Auswertungen mit der kleineren Abweichung der Molzahlen zusammengefasst.

Tabelle 3.14: $K_{x,i}$ des Systems Butanal und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295\text{ K}$

| n_B^0 | n_{1-P}^0 | x_B | x_{1-P} | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_B/n_{1-P}$ |
|---------|-------------|-------|-----------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|----------------------|
| 20,0 | 80,0 | 0,055 | 0,764 | 0,181 | - | - | 4,31 | - | - | -20,0 |
| 40,0 | 60,0 | 0,207 | 0,480 | 0,305 | 0,008 | - | 3,07 | 0,042 | - | -15,9 |
| 50,0 | 50,0 | 0,313 | 0,334 | 0,337 | 0,012 | 0,004 | 3,22 | 0,036 | 0,363 | 5,5 |
| 60,1 | 39,9 | 0,467 | 0,221 | 0,293 | 0,013 | 0,005 | 2,84 | 0,033 | 0,316 | 1,2 |
| 80,0 | 20,0 | 0,763 | 0,071 | 0,151 | 0,010 | 0,005 | 2,81 | 0,031 | 0,232 | -4,8 |

Für alle drei untersuchten Reaktionen der Halbacetalbildung nehmen die konzentrationsabhängigen Pseudogleichgewichtskonstanten $K_{x,i}$ mit steigender Aldehydkonzentration bzw. sinkender Alkoholkonzentration ab. Durch die z. T. größeren Abweichungen der Molzahlen der nichtäquimolaren Einsatzmischungen kann nicht ausgeschlossen werden, dass dieser Effekt nicht nur konzentrationsabhängig ist, sondern von Ungenauigkeiten in den Messungen mitverursacht wird.

Die Umrechnung der konzentrationsabhängigen Pseudogleichgewichtskonstanten K_x in eine von der Konzentration unabhängige Gleichgewichtskonstante K erfolgt in Kapitel 5.1.

3.3.3 Einfluss der Temperatur auf die Gleichgewichtskonstante

Der Einfluss der Temperatur auf die Lage der Pseudogleichgewichtskonstanten wird stellvertretend an zwei Beispielen erläutert.

^{13}C -Spektren der Mischung aus 49,8 Mol% Acetaldehyd und 50,2 Mol% Methanol wurden bei 295 K, 273 K und 255 K aufgenommen. Da sich Lage und Anzahl der Signale bei den ausgewählten Temperaturen nicht unterscheiden (vgl. Abb. 3.11), hat die Änderung der Temperatur keinen Einfluss auf die ablaufenden Reaktionstypen.

Im Gegensatz dazu verschieben sich die Verhältnisse der Signalflächen in Abhängigkeit von der Temperatur (vgl. Tabelle 3.15), d. h., die Temperatur beeinflusst den Umsatz der Reaktionen und damit die Zahlenwerte der Pseudogleichgewichtskonstanten $K_{x,i}$.

Die Temperatur hat fast keinen Einfluss auf die absoluten Abweichungen der Peakflächen. Sie liegen für alle Komponenten im selben Bereich. Für das Halbacetal 1

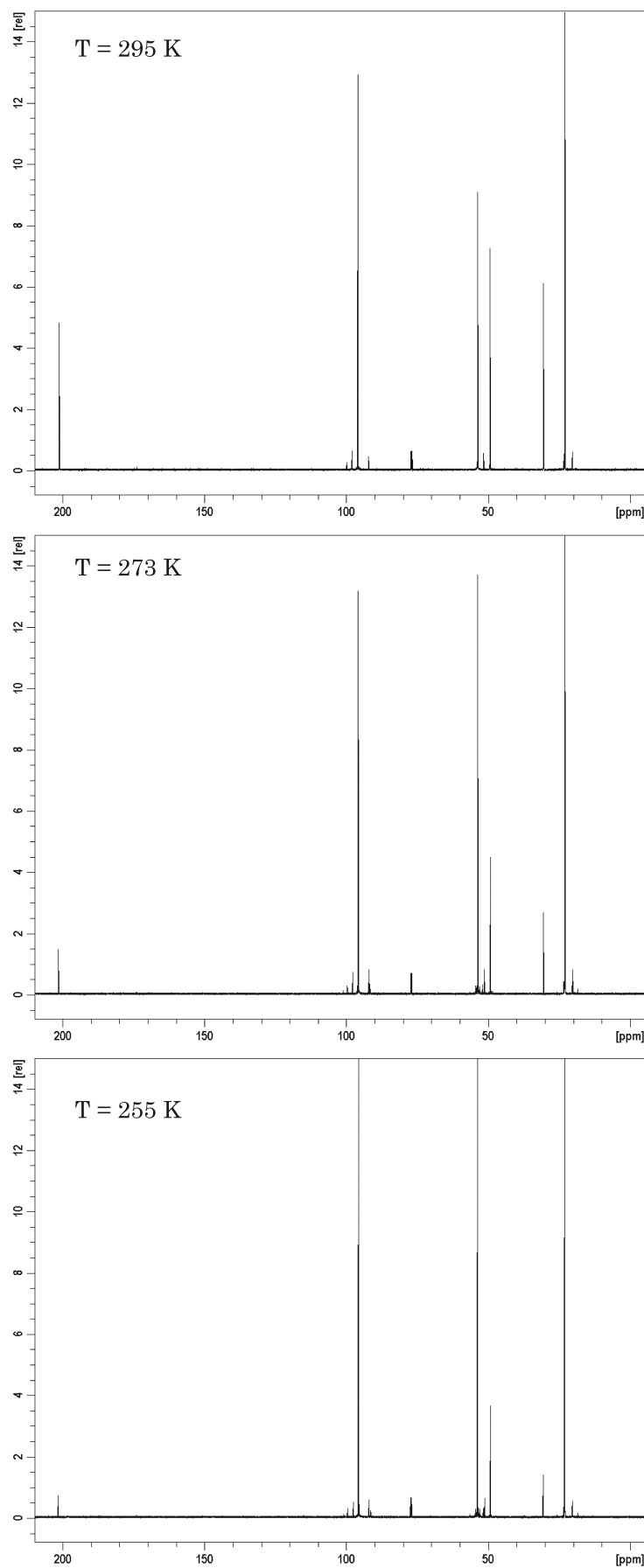


Abbildung 3.11: ^{13}C -Spektren der Mischung aus 49,8 Mol% Acetaldehyd und 50,2 Mol% Methanol bei 295 K, 273 K und 255 K

Tabelle 3.15: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,8 Mol% Acetaldehyd und 50,2 Mol% Methanol in Abhängigkeit von der Temperatur, Bezugsgröße Methanol

| | Acetaldehyd | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------|--------------|------------------|----------|-------------|--------------|-----------------|---|------------------|---|--|
| T [K] | A_A | \bar{A}_A | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 295 | 0,85 0,85 | $0,85 \pm 0,003$ | 1,0 | 1,0 | 2,09 2,36 | $2,23 \pm 0,14$ | 0,083 0,075 0,073 0,095 0,091 | $0,083 \pm 0,01$ | 0,032 0,034 0,060 0,037 | $0,033 \pm \begin{smallmatrix} 0,005 \\ 0,003 \end{smallmatrix}$ |
| 273 | 0,60 0,62 | $0,61 \pm 0,009$ | 1,0 | 1,0 | 3,92 4,22 | $4,07 \pm 0,15$ | 0,210 0,206 0,205 0,194 | $0,204 \pm 0,01$ | 0,063 0,076 0,079 0,075 0,073 | $0,073 \pm \begin{smallmatrix} 0,005 \\ 0,01 \end{smallmatrix}$ |
| 255 | 0,46 0,47 | $0,46 \pm 0,004$ | 1,0 | 1,0 | 6,03 6,32 | $6,18 \pm 0,15$ | 0,267 0,242 0,253 0,232 | $0,249 \pm 0,02$ | 0,101 0,116 0,104 0,104 0,104 | $0,106 \pm \begin{smallmatrix} 0,01 \\ 0,005 \end{smallmatrix}$ |

beispielsweise beträgt die absolute Abweichung bei 295 K $\pm 0,14$ und für 273 K sowie 255 K $\pm 0,15$. Da sich die Signalgrößen in Abhängigkeit von der Temperatur, insbesondere für HA 1, stark verändern, hat die Temperatur Einfluss auf die relative Abweichung. Diese sinkt für HA 1 von etwa 6 % bei 295 K über 4 % bei 273 K auf etwa 2 % bei 255 K.

Die Bildung des Halbacetals 1 aus Aldehyd und Alkohol ist eine exotherme Reaktion. Bei exothermen Reaktionen verschiebt sich die Lage des Gleichgewichts mit abnehmender Temperatur auf die Seite der Produkte: Es werden bei tieferen Temperaturen mehr Produkte gebildet als bei hohen Temperaturen, d. h., eine Temperaturerniedrigung bewirkt einen größeren Wert der Pseudogleichgewichtskonstanten.

Im System aus Acetaldehyd und Methanol steigt der Wert der Pseudogleichgewichtskonstanten $K_{x,HA1} = 11,2$ bei 295 K über $K_{x,HA1} = 39,9$ bei 273 K auf $K_{x,HA1} = 103$ bei 255 K an (vgl. Tabelle 3.16).

Tabelle 3.16: $K_{x,i}$ der Mischung aus 49,8 Mol% Acetaldehyd und 50,2 Mol% Methanol in Abhängigkeit von der Temperatur, Bezugsgröße Methanol

| T[K] | n_A^0 | n_M^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_A/n_M$ |
|------|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|----------------------|----------------------|------------------|
| 295 | 49,8 | 50,2 | 0,198 | 0,240 | 0,534 | 0,020 | 0,008 | 11,2 | $1,68 \cdot 10^{-2}$ | $1,77 \cdot 10^{-1}$ | -2,7 |
| 273 | 49,8 | 50,2 | 0,102 | 0,168 | 0,683 | 0,034 | 0,012 | 39,9 | $1,23 \cdot 10^{-2}$ | $8,82 \cdot 10^{-2}$ | -0,3 |
| 255 | 49,8 | 50,2 | 0,060 | 0,125 | 0,771 | 0,031 | 0,013 | 103 | $6,51 \cdot 10^{-3}$ | $6,88 \cdot 10^{-2}$ | 4,0 |

Die Reaktion des Halbacetals 1 zu Halbacetal 2 bzw. Halbacetal 3 ist eine endotherme Reaktion. Mit sinkender Temperatur verschiebt sich die Lage des Gleichgewichts auf die Seite der Edukte und der Wert der Pseudogleichgewichtskonstanten nimmt ab (vgl. Tabelle 3.16). Die Gleichgewichtskonstante für die Bildung von Halbacetal 2 sinkt von $K_{x,HA2} = 0,017$ bei 295 K auf $K_{x,HA2} = 0,007$ bei 255 K. Für die Reaktion zum Halbacetal 3 sinkt die Gleichgewichtskonstante von $K_{x,HA3} = 0,177$ bei 295 K auf $K_{x,HA3} = 0,069$ bei 255 K. Die Ergebnisse zeigen, dass der Temperatureinfluss auf die exotherme Reaktion zum Halbacetal 1 deutlich größer ist als auf die endothermen Reaktionen zu Halbacetal 2 bzw. Halbacetal 3.

Die Temperaturänderung bewirkt auch einen Einfluss im relativen Fehler der Molzahlen: Dieser sinkt von -2,7 % bei 295 K auf -0,3 % bei 273 K und steigt bei 255 K auf 4 % an. Insgesamt ist aber die Änderung des relativen Fehlers in Abhängigkeit von der Temperatur klein. Die Temperatur hat damit keinen entscheidenden Einfluss auf die Genauigkeit der berechneten Pseudogleichgewichtskonstanten K_x . Der Einfluss der Temperatur auf die Pseudogleichgewichtskonstanten $K_{x,i}$ der Reaktionen ist in der Abbildung 3.12 dargestellt. Aufgetragen ist der natürliche Lo-

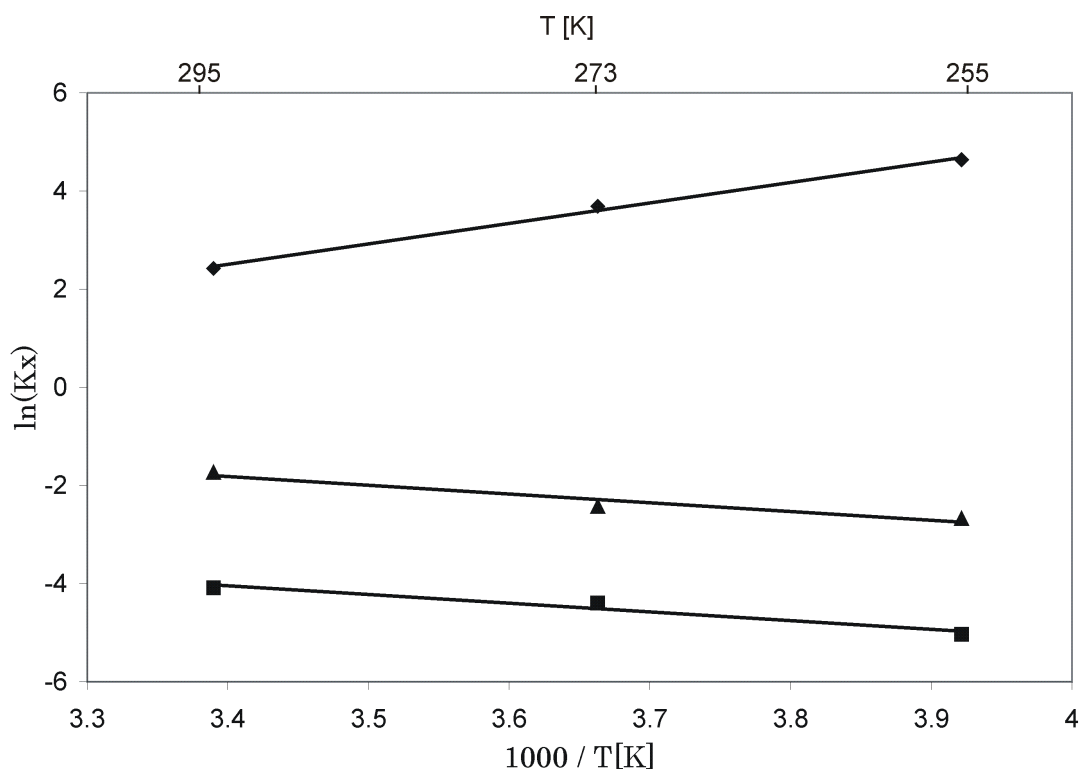


Abbildung 3.12: Pseudogleichgewichtskonstanten $K_{x,HA1}$ (◆), $K_{x,HA2}$ (▲) und $K_{x,HA3}$ (■) der Mischung aus 49,8 Mol% Acetaldehyd und 50,2 Mol% Methanol in Abhängigkeit von der Temperatur

garithmus der Pseudogleichgewichtskonstanten (bei einer nahezu äquimolaren Zusammensetzung der Einsatzmischung aus Acetaldehyd und Methanol) über dem Kehrwert der Temperatur. Der Wert der Pseudogleichgewichtskonstanten $K_{x,HA1}$ für die Reaktion zum Halbacetal 1 nimmt mit steigender Temperatur deutlich ab. Für die beiden Folgereaktionen zu Halbacetal 2 und Halbacetal 3 nimmt der Wert der Pseudogleichgewichtskonstanten mit steigender Temperatur leicht zu.

Für die Mischung aus 48,6 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 49,4 Mol% 1-Propanol wurde nur bei den Temperaturen 295 K und 273 K ein ^{13}C -Spektrum aufgenommen. Bei 255 K war die Probe trüb, so dass keine Messung durchgeführt werden konnte. Die Trübung wird wahrscheinlich dadurch verursacht, dass die Mischung im NMR-Röhrchen bei dieser Temperatur teilweise gefroren war. Auch für dieses System unterscheiden sich Lage und Anzahl der Signale nicht in Abhängigkeit von der Temperatur (vgl. Abbildung 3.13), d. h., die Temperatur hat keinen Einfluss auf die Reaktionstypen.

Die Verhältnisse der Signalflächen verschieben sich in Abhängigkeit von der Temperatur (vgl. Tabelle 3.17), d. h., die Temperatur beeinflusst den Umsatz der Reaktionen und damit die Pseudogleichgewichtskonstanten.

Tabelle 3.17: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,6 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd + 49,4 Mol% 1-Propanol in Abhängigkeit von der Temperatur, Bezugsgröße 1-Propanol

| | 2-Chlorbenzaldehyd | | 1-Propanol | | VA | | HA 1 | |
|-------|--------------------|---------------------------|------------|---------------------------|----------|---------------------------|-----------|-----------------------------|
| T [K] | A_{2-CB} | \bar{A}_{2-CB} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 295 | 1,319 | $1,336 \pm 0,02$ | 1,0 | $1,026 \pm_{0,03}^{0,04}$ | 0,2584 | $0,243 \pm 0,02$ | 0,1161 | $0,114 \pm_{0,006}^{0,009}$ |
| | 1,408 | | 1,017 | | 0,2562 | | 0,1223 | |
| | 1,348 | | 1,061 | | 0,2459 | | 0,1196 | |
| | 1,415 | | | | 0,2649 | | 0,1032 | |
| | 1,356 | | | | 0,2552 | | 0,1122 | |
| | 1,319 | | | | 0,2194 | | 0,1078 | |
| | | | | | 0,2270 | | 0,1150 | |
| | | | | | 0,4653 | | | |
| 273 | | | | | 0,4781 | | | |
| | 1,517 | $1,570 \pm_{0,09}^{0,06}$ | 1,0 | $1,014 \pm_{0,01}^{0,02}$ | 0,6195 | $0,583 \pm_{0,03}^{0,04}$ | 0,1968 | $0,199 \pm 0,01$ |
| | 1,620 | | 1,029 | | 0,6258 | | 0,1989 | |
| | 1,541 | | 1,013 | | 0,5617 | | 0,2024 | |
| | 1,634 | | | | 0,5907 | | 0,2013 | |
| | 1,478 | | | | 0,6208 | | 0,2067 | |
| | 1,631 | | | | 0,5502 | | 0,1893 | |
| | | | | | 0,5584 | | 0,1859 | |
| | | | | | 1,1221 | | 0,2088 | |
| | | | | | 1,1631 | | | |

Die Reaktion zum Halbacetal 1 ist eine exotherme Reaktion, d. h., der Wert der Pseudogleichgewichtskonstanten nimmt mit sinkender Temperatur von $K_{x,HA1} = 0,256$ bei 295 K auf $K_{x,HA1} = 0,499$ bei 273 K zu. Bei der Folgereaktion zum Vollacetal handelt es sich, ebenso wie bei der Bildung von Halbacetal 1, um eine exotherme Reaktion, da die Gleichgewichtskonstante $K_{x,VA}$ mit steigender Temperatur abnimmt (vgl. Tabelle 3.18). Bei 295 K beträgt $K_{x,VA} = 0,505$ und steigt bei 273 K auf $K_{x,VA} = 1,686$.

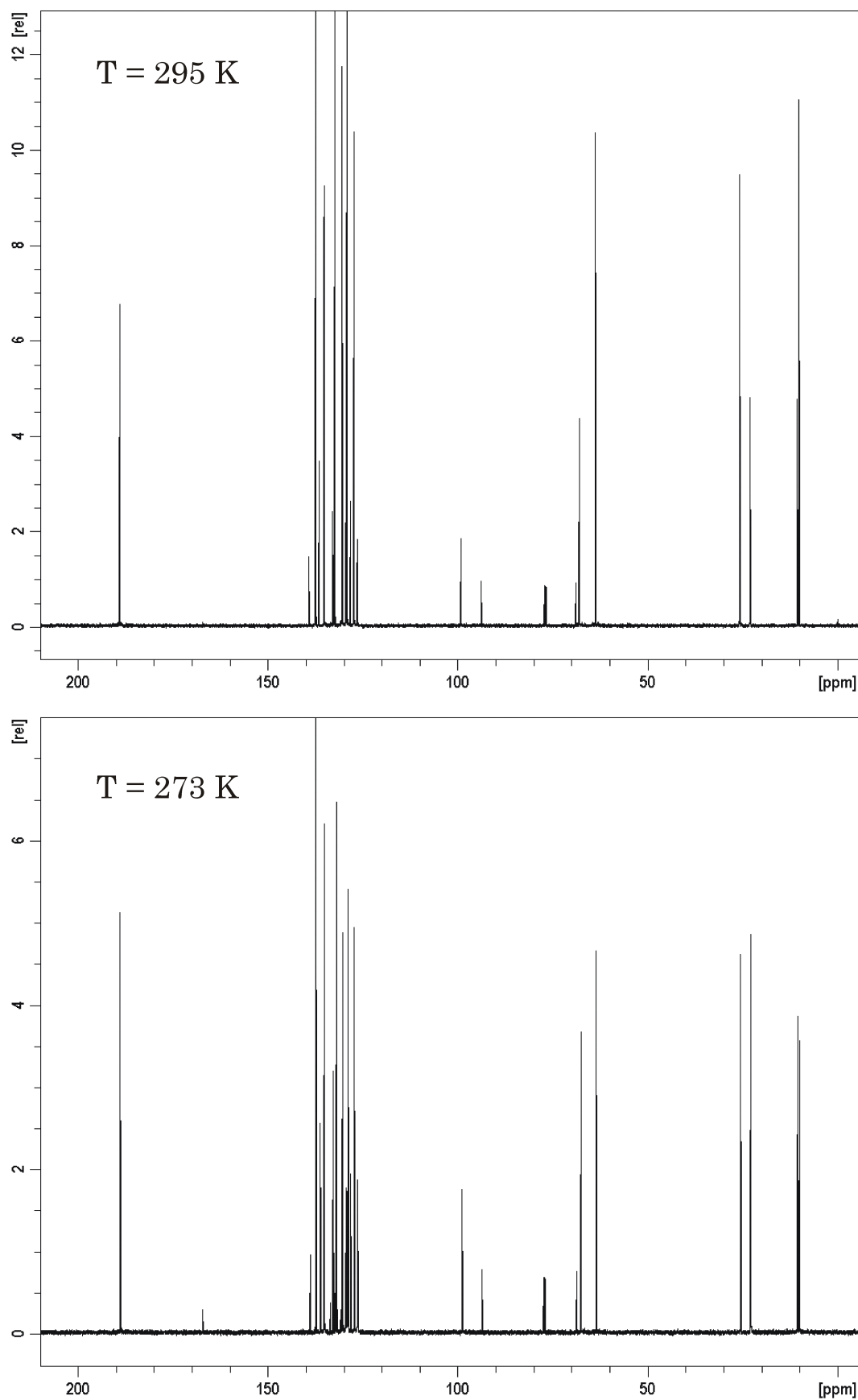


Abbildung 3.13: ^{13}C -Spektren der Mischung aus 48,6 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd + 49,4 Mol% 1-Propanol bei 295 K und 273 K

Tabelle 3.18: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x der Mischung aus 48,6 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd + 49,4 Mol% 1-Propanol in Abhängigkeit von der Temperatur, Bezugsgröße 1-Propanol

| T[K] | n_{2-C}^0 | n_{1-P}^0 | x_{2-C} | x_{1-P} | x_{HA1} | x_{VA} | x_W | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,VA}$ | $\Delta n_{2C}/n_{1P}$ |
|------|-------------|-------------|-----------|-----------|-----------|----------|-------|-------------|------------|------------------------|
| 295 | 48,6 | 49,4 | 0,433 | 0,358 | 0,040 | 0,085 | 0,085 | 0,256 | 0,505 | -7,0 |
| 273 | 48,6 | 49,4 | 0,393 | 0,259 | 0,051 | 0,149 | 0,149 | 0,499 | 1,686 | -1,9 |

Der Zahlenwert des relativen Fehlers in den Molzahlen nimmt, analog zur Mischung aus Acetaldehyd und Methanol, von 295 K auf 273 K leicht ab.

In der Abbildung 3.14 ist der Einfluss der Temperatur auf die Gleichgewichtskonstante zusammenfassend dargestellt. Aufgetragen ist der natürliche Logarithmus der Pseudogleichgewichtskonstanten $K_{x,VA}$ bzw. $K_{x,HA1}$ über dem Kehrwert der Temperatur.

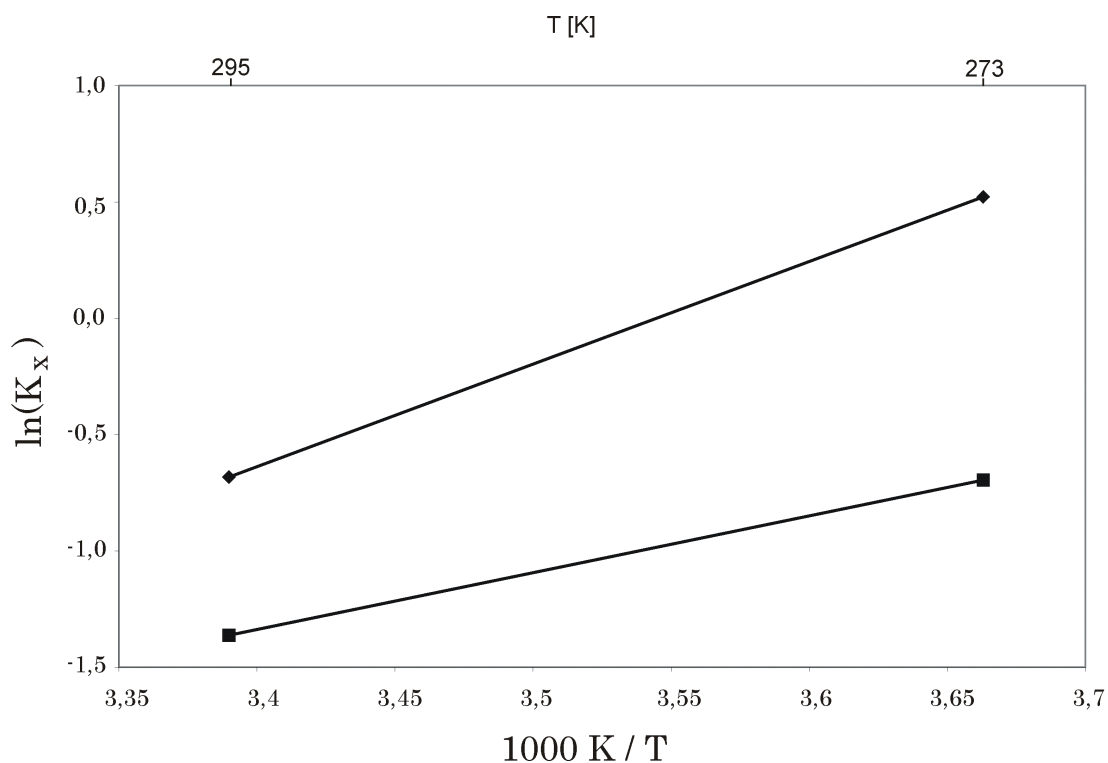


Abbildung 3.14: Pseudogleichgewichtskonstanten $K_{x,VA}$ (◆) und $K_{x,HA1}$ (■) der Mischung aus 48,6 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 49,4 Mol% 1-Propanol in Abhängigkeit der Temperatur

4 Quantenchemie

Die Quantenchemie ist ein Teilgebiet der theoretischen Chemie, in dem chemische Problemstellungen mit Hilfe von quantenmechanischen Methoden rechnerisch gelöst werden. Mit quantenchemischen Berechnungen können z.B. Informationen über die Struktur und Reaktivität sowohl von neuen bisher nicht hergestellten Verbindungen als auch von instabilen Substanzen erhalten werden. Damit kann man allein mit quantenchemischer Software Probleme einkreisen und z. B. Stoffe „screenen“, um anschließend nur die Substanzen experimentell weiter zu untersuchen, die am meisten Erfolg versprechen. Dies ermöglicht bei der Entwicklung neuer Wirkstoffe wesentliche Ersparnisse von Zeit und Kosten.

4.1 Grundlagen

4.1.1 Quantenmechanik

Die Aufgabe der Quantentheorie besteht darin, die Eigenschaften von Stoffen vorherzusagen und zu interpretieren. Die Quantenmechanik erweitert die klassische Mechanik, die die Bewegungen materieller Körper in Raum und Zeit unter dem Einfluss von Kräften beschreibt.

Zu Beginn des 20. Jahrhunderts ließen sich eine Reihe von gesicherten experimentellen Beobachtungen aus verschiedenen Gebieten der Physik, z. B. der Wärmestrahlung, der Erforschung des Atomaufbaus und der Eigenschaften des Lichts mit Theorien der klassischen Physik nicht korrekt beschreiben. Die Suche nach neuen Ansätzen führte zur Entdeckung des Planckschen Wirkungsquantums ($h = 6,624 \cdot 10^{-34}$ Js) im Jahr 1900. Max Planck postulierte bei seiner Beschreibung der Wärme- (Hohlraum-) Strahlung, dass elektrische Strahlung der Frequenz ν nur in ganzzahligen Vielfachen von $h\nu$ ($\hbar = \frac{h}{2\pi}$) emittiert wird [Nol04]. Diese Beobachtung wird als Quantisierung bezeichnet: Bestimmte Größen, wie z. B. die Energie und der Drehimpuls, sind „gequantelt“ und können nur bestimmte Werte annehmen.

Die moderne Quantenmechanik hat ihren Ursprung im Jahre 1925 [Dah01] mit der Formulierung der Matrizenmechanik von Heisenberg, Born und Jordan. Unabhängig davon formulierte Schrödinger wenige Monate später, ausgehend von de Broglies Theorie der Materiewellen, einen äquivalenten Ansatz: Die Wellenmechanik bzw. die Schrödinger-Gleichung [Sch26].

Die Quantenmechanik ist in der Lage, alle physikalischen Erfahrungen widerspruchsfrei zu beschreiben. Weiterführende Informationen sind in einschlägigen Werken, wie z. B. Nolting [Nol04], Dahl [Dah01], Koch und Holthausen [KH01] oder Greiner [Gre05] zu finden.

4.1.1.1 Schrödinger-Gleichung

Die Schrödinger-Gleichung [Sch26] ist die zentrale Gleichung der Quantenmechanik:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (4.1)$$

Sie ist eine Eigenwertgleichung, welche die Gesamtenergie E (Eigenwert) eines Molekülsystems, das aus N Kernen und n Elektronen besteht, über den Hamilton-Operator \hat{H} mit der Wellenfunktion Ψ (Eigenfunktion) verknüpft.

Ein Operator \hat{O} ist eine Rechenvorschrift, die als Eingabe eine Funktion benötigt und als Ausgabe eine (andere) Funktion liefert. Sowohl der Hamilton-Operator als auch die Wellenfunktion sind von allen Teilchenkoordinaten abhängig. Die Wellenfunktion Ψ enthält alle Informationen des untersuchten Quantensystems. Der Hamilton-Operator setzt sich aus einem Anteil für die kinetische Energie (\hat{T}) und einem Anteil für die potentielle Energie (\hat{V}) zusammen:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} \quad (4.2)$$

Der kinetische Anteil ergibt sich aus den Beiträgen der kinetischen Energien der Elektronen und der Kerne:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^n \nabla_i^2 - \frac{\hbar^2}{2} \sum_{A=1}^N \frac{1}{M_A} \nabla_A^2 \quad (4.3)$$

Dabei ist n bzw. N die Anzahl der Elektronen bzw. der Kerne, m_e ist die Elektronenmasse und M_A die Masse des Kernels A . Der Laplace-Operator ∇_q^2 ist in kartesischen Koordinaten folgendermaßen definiert:

$$\nabla_q^2 = \left(\frac{\partial^2}{\partial x_q^2}, \frac{\partial^2}{\partial y_q^2}, \frac{\partial^2}{\partial z_q^2} \right). \quad (4.4)$$

Die potentielle Energie setzt sich aus drei Beiträgen zusammen: elektrostatische Elektron-Kern-Anziehung, Elektron-Elektron-Abstoßung und Kern-Kern-Abstoßung.

$$\hat{V} = -e^2 \sum_{i=1}^n \sum_{A=1}^N \frac{Z_A}{r_{iA}} + e^2 \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \frac{1}{r_{ij}} + e^2 \sum_{A=1}^{N-1} \sum_{B=A+1}^N \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}} \quad (4.5)$$

In dieser Gleichung ist e die Elementarladung, Z_A bzw. Z_B sind die Ladungen der Kerne A und B , r_{iA} ist der Abstand zwischen dem Elektron i und dem Kern A , r_{ij} ist der Abstand zwischen den beiden Elektronen i und j und R_{AB} ist der Abstand zwischen den Kernen A und B .

Das grundlegende Problem der Quantenmechanik besteht darin, dass die Schrödinger-Gleichung für Systeme mit mehr als zwei Teilchen analytisch nicht lösbar ist. Aus diesem Grund wird schon seit Jahrzehnten nach Möglichkeiten gesucht, die Schrödinger-Gleichung zu vereinfachen.

4.1.2 Quantenchemische Methoden

Das Ziel von quantenchemischen Methoden, die in kommerziellen Softwarepaketen wie z. B. Gaussian, Gamess US, Mopac, HyperChem und Spartan enthalten sind, besteht darin, die zeitunabhängige, nicht relativistische Schrödinger-Gleichung näherungsweise zu lösen. Quantenchemische Methoden können in drei Kategorien eingeteilt werden:

- *Ab Initio*-Methoden
- Semiempirische Methoden
- Dichtefunktionalmethoden

***Ab Initio*-Methoden**

Ab initio (lat.: “von Anfang an”)-Verfahren verwenden Naturkonstanten, aber keine experimentell bestimmten Daten.

Das zentrale *ab initio*-Verfahren, das Kernstück fast aller konventionellen, d. h. wellenfunktionsbasierten quantenchemischen Methoden, ist das Hartree-Fock (HF)-Verfahren. Für weiterführende Informationen sei auf einschlägige Literatur, z. B. Szabo und Ostlund [SO82], Dahl [Dah01], Koch und Holthausen [KH01] oder Jensen [Jen07], verwiesen.

Die Hartree-Fock-Näherung ersetzt die komplizierte Vielelektronenwellenfunktion durch ein antisymmetrisches Produkt von n Einelektronenwellenfunktionen, indem die Elektronenabstoßung vernachlässigt wird und dadurch die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen als unabhängig voneinander betrachtet wird. Damit kann der Hamilton-Operator \hat{H} als Summe von Einelektronenoperatoren $\hat{h}(i)$

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^n \hat{h}(i) \quad (4.6)$$

mit

$$\hat{h}(i) = -\frac{1}{2}\nabla_i^2 - \sum_{A=1}^N \frac{Z_A}{r_{iA}} \quad (4.7)$$

beschrieben werden.

In der Realität ist die Elektronenbewegung korreliert und der damit verbundene Fehler wird als Korrelationsenergie bezeichnet. Um diese Unzulänglichkeit des Hartree-Fock-Verfahrens zu beseitigen, wurden verschiedene post-HF-Methoden zur Berechnung der Korrelationsenergie entwickelt:

- Störungstheoretischer Ansatz: Møller-Plesset-Verfahren (MPn, n = Ordnung der Korrektur, gängigstes Verfahren: MP2)
- Variationstheoretischer Ansatz: CI (configuration interaction)-Verfahren
- Andere Ansätze: z. B. Coupled-Cluster, Quadratic CI

Die *ab initio*-Verfahren sind methodisch gesehen die aufwändigsten aber auch die genauesten Verfahren.

Semiempirische Methoden

Obwohl beim Hartree-Fock-Ansatz weitreichende Näherungen verwendet werden, wird zur Lösung der Schrödinger-Gleichung immer noch ein erheblicher Rechenaufwand benötigt. Deshalb werden in semiempirischen Methoden weitere Vereinfachungen eingeführt. Der Rechenzeitbedarf wird dadurch verkürzt, dass bestimmte Integraltypen ganz vernachlässigt oder an experimentell bestimmte Parameter angepasst werden, d. h. semiempirische Verfahren basieren auf experimentellen Daten. Verschiedene semiempirische Methoden enthalten unterschiedliche Näherungen, basierend auf unterschiedlichen experimentellen Datensätzen und besitzen dadurch unterschiedliche Parametrisierungen. Die semiempirischen Methoden werden üblicherweise mit Abkürzungen gekennzeichnet. Bekannte Vertreter dieser Methoden sind MNDO [DT77], AM1 [DZH85] oder PM3 [Ste89]. Die Zuverlässigkeit von semiempirischen Methoden ist begrenzt.

Dichtefunktionalmethoden

Die traditionellen quantenchemischen Methoden verwenden als zentrale Größe die Wellenfunktion, aus der alle Eigenschaften berechnet werden können. Im Gegensatz dazu verwenden Dichtefunktionalmethoden als zentrale Größe die Elektronendichte, die die Wahrscheinlichkeit beschreibt, an einem bestimmten Punkt im Raum ein Elektron anzutreffen. Da die Elektronendichte nur von den drei Raumrichtungen abhängt, ist sie wesentlich einfacher zu behandeln als die Wellenfunktion, die von allen Kern- und Elektronenkoordinaten abhängt. Im Gegensatz zur Wellenfunktion kann die Elektronendichte auch experimentell, z. B. über Röntgenstrahlbeugung, bestimmt werden.

Ein Funktional $F[f(x)]$ ist eine Rechenvorschrift, die als Eingabe eine Funktion verwendet und als Ergebnis eine Zahl liefert:

$$f(x) \xrightarrow{F[f(x)]} y \quad (4.8)$$

Dichtefunktionalmethoden bieten den Vorteil, Rechenergebnisse mit der Qualität der Ergebnisse hochkorrelierter *ab initio*-Methoden mit geringer Rechenzeit (vergleichbar der von HF-Verfahren) zu ermöglichen. Die Bedeutung der Dichtefunktionaltheorie (DFT) hat u.a. deshalb in den letzten Jahren stark zugenommen (vgl. z. B. [KH01]).

Da die quantenchemischen Berechnungen der vorliegenden Arbeit mit Dichtefunktionalmethoden durchgeführt wurden, wird im folgenden Kapitel näher auf die theoretischen Grundlagen dieser Methoden eingegangen.

4.1.2.1 Dichtefunktionaltheorie

Die Grundlagen der heute verwendeten Dichtefunktionaltheorie gehen auf Hohenberg und Kohn [HK64] zurück. Das erste Hohenberg-Kohn-Theorem besagt, dass der Grundzustand eines Systems von n Elektronen eine eindeutige ortsabhängige Elektronendichte $\rho(\vec{r})$ besitzt. Diese ist als Mehrfachintegral definiert:

$$\rho(\vec{r}) = n \int \dots \int |\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n)|^2 d\vec{s}_1 d\vec{x}_2 \dots d\vec{x}_n \quad (4.9)$$

Der Grundzustand eines Systems ist der Zustand, in dem das System seine geringste mögliche Energie besitzt. Die Größe \vec{x} fasst die $3n$ räumlichen Koordinaten \vec{r} des Systems mit den n Spinkoordinaten s der Elektronen zu einer Größe zusammen. Aus der Elektronendichte können der Hamilton-Operator und damit alle Eigenschaften des Systems im Grundzustand bestimmt werden.

Da die gesamte Energie im Grundzustand ein Funktional der Elektronendichte im Grundzustand ist, müssen auch deren Komponenten Funktionale der Elektronendichte sein. Die Energie wird aufgeteilt in die potentielle Energie der Elektron-Kern-Anziehung $E_{ne}[\rho_0]$, die vom untersuchten System abhängt

$$E_{ne}[\rho_0] = \int \rho_0(\vec{r}) V_{ne} d\vec{r} \quad (4.10)$$

und den Anteil, der unabhängig vom untersuchten System ist und sich aus der kinetischen Energie $T[\rho_0]$ und der Energie der Elektron-Elektron-Wechselwirkung $E_{ee}[\rho_0]$ zusammensetzt:

$$E_0[\rho_0] = T[\rho_0] + E_{ee}[\rho_0] + E_{ne}[\rho_0] \quad (4.11)$$

Die systemunabhängigen Terme werden in einer neuen Größe, dem sogenannten Hohenberg-Kohn-Funktional F_{HK} zusammengefasst:

$$F_{HK}[\rho_0] = T[\rho_0] + E_{ee}[\rho_0] \quad (4.12)$$

Die Schrödinger-Gleichung könnte exakt und nicht nur näherungsweise gelöst werden, wenn das Hohenberg-Kohn-Funktional F_{HK} bekannt wäre. Da das Funktional $F_{HK}[\rho]$ nicht bekannt ist, werden bei praktischen Anwendungen der Dichtefunktionaltheorie Näherungen verwendet.

Der Ansatz von Kohn und Sham [KS65] brachte einen Durchbruch bei der Entwicklung des benötigten Funktionals. Durch dieses Verfahren wird so viel Information wie möglich exakt berechnet und nur ein kleiner Anteil der Gesamtenergie durch

ein genähertes Funktional bestimmt. Kohn und Sham führen ein nichtwechselwirkendes Referenzsystem (Subskript S) mit derselben Elektronendichte wie das Ausgangssystem ein, das aus einem Satz von Orbitalen φ_i (z. B. Einelektronenfunktionen) gebildet wird, um den Hauptteil der kinetischen Energie exakt zu berechnen:

$$T_S = -\frac{1}{2} \sum_i^n \langle \varphi_i | \nabla^2 | \varphi_i \rangle \quad (4.13)$$

Auch wenn der nichtwechselwirkenden kinetischen Energie dieselbe Elektronendichte zugrunde liegt, ist sie nicht gleich der wahren kinetischen Energie. Für das gesuchte Funktional ergibt sich folgende Beziehung:

$$F[\rho(\vec{r})] = T_S[\rho(\vec{r})] + J[\rho(\vec{r})] + E_{XC}[\rho(\vec{r})] \quad (4.14)$$

J ist der klassische Coulomb-Anteil der Ladungsverteilung und E_{XC} (die Austausch-Korrelationsenergie) ist das Funktional, das alle unbekannten, nicht exakt berechenbaren Anteile enthält. Das nichtwechselwirkende Referenzsystem wird durch eine Slater-Determinante Θ_S beschrieben, die die gleiche Elektronendichte wie das reale wechselwirkende System besitzt:

$$\Theta_S = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(\vec{x}_1) & \varphi_2(\vec{x}_1) & \dots & \varphi_n(\vec{x}_1) \\ \varphi_1(\vec{x}_2) & \varphi_2(\vec{x}_2) & \dots & \varphi_n(\vec{x}_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \varphi_1(\vec{x}_n) & \varphi_2(\vec{x}_n) & \dots & \varphi_n(\vec{x}_n) \end{vmatrix} \quad (4.15)$$

Die Spinorbitale φ_i sind Lösungen von n Einteilchengleichungen, den sogenannten Kohn-Sham-Gleichungen:

$$\hat{f}^{KS} \varphi_i = \epsilon_i \varphi_i \quad (4.16)$$

ϵ_i ist die Energie des Systems und \hat{f}^{KS} der Einelektron-Kohn-Sham-Operator:

$$\hat{f}^{KS} = -\frac{1}{2} \nabla^2 + V_S(\vec{r}). \quad (4.17)$$

$V_S(\vec{r})$ ist das lokale Potential des nichtwechselwirkenden Referenzsystems. Die Orbitale werden üblicherweise als Kohn-Sham-Orbitale oder kurz als KS-Orbitale bezeichnet.

Wenn die exakte Form von E_{XC} bekannt wäre, würde die Kohn-Sham-Strategie zur exakten Energie, d. h. zum korrekten Eigenwert des Hamilton-Operators der Schrödinger-Gleichung führen. Im Gegensatz zum Hartree-Fock-Modell, das schon

von Beginn an auf einer Näherung basiert, ist der Kohn-Sham-Ansatz grundsätzlich exakt. Die Näherung wird erst bei der Wahl des unbekannten Funktionals E_{XC} für die Austausch-Korrelationsenergie eingeführt.

Da die Qualität der Dichtefunktionaltheorie-Methoden von der Genauigkeit der gewählten Näherung für E_{XC} abhängt, ist das Entwickeln immer besserer Funktionale das Kernstück der Dichtefunktionaltheorie. Die meisten Funktionale werden nach den Initialen ihrer Entwickler kombiniert mit ihrem Erscheinungsjahr benannt. Das Austausch-Korrelationsfunktional E_{XC} wird üblicherweise in Austausch- und Korrelationsfunktionale aufgespalten.

Es werden folgende Ansätze unterschieden:

- Local Density Approximations (LDA)
- Generalized Gradient Approximations (GGA)
- Hybridfunktionale

Local Density Approximations

Diese (älteren) Ansätze basieren auf der Idee eines hypothetischen einheitlichen Elektronengases. Die Grundlage des Modells ist die Annahme, dass E_{XC} in der folgenden, sehr einfachen Form geschrieben werden kann:

$$E_{XC}^{LDA}[\rho] = \int \rho(\vec{r}) \epsilon_{XC}(\rho(\vec{r})) d\vec{r} \quad (4.18)$$

$\epsilon_{XC}(\rho(\vec{r}))$ ist die Austauschkorrelationsenergie pro Partikel eines einheitlichen Elektronengases der Dichte $\rho(\vec{r})$ und kann in einen Austausch- und einen Korrelationsbeitrag aufgeteilt werden:

$$\epsilon_{XC}(\rho(\vec{r})) = \epsilon_X(\rho(\vec{r})) + \epsilon_C(\rho(\vec{r})) \quad (4.19)$$

Die Austauschenergie kann z. B. durch die Dirac-Formel beschrieben werden:

$$E_X^{LDA}[\rho] = -\frac{3}{4} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \int \rho^3(\vec{r}) d\vec{r} \quad (4.20)$$

Ein häufig verwendeter Ansatz für die Korrelationsenergie [KH01] ist das Funktional von Vosko, Wilk und Nusair (VWN-Funktional [VWN80]).

Generalized Gradient Approximations

Diese Ansätze verwenden nicht nur die Elektronendichte $\rho(\vec{r})$ selbst, sondern auch deren Gradienten, um die Inhomogenität der wahren Elektronendichte zu berücksichtigen. Typische Ansätze für Austauschfunktionale sind beispielsweise B86 [Bec86], B bzw. B88 [Bec88], PW86 [PW86], PW91 [PY92], FT97 [FT97] und für Korrelationsfunktionale P86 [Per86], PW91 [PY92] und LYP [LYP88].

Prinzipiell kann jedes Austauschfunktional mit jedem Korrelationsfunktional kombiniert werden, aber nur wenige Kombinationen werden zurzeit verwendet [KH01].

Als Austauschfunktional wird fast ausschließlich das Funktional von Becke (B) in Kombination mit den Korrelationsfunktionalen von Perdew (P86) und Lee, Yang, Parr (LYP) verwendet.

Hybridfunktionale

Die neuesten Ansätze, die sogenannten Hybridfunktionale, definieren die Austauschfunktionale als eine Linearkombination von Hartree-Fock-, lokalen und gradientkorrigierten Austauschbeiträgen. Da üblicherweise die Austauschbeiträge deutlich größer als die entsprechenden Korrelationseffekte sind, ist eine genaue Beschreibung des Austauschfunktionals eine Grundvoraussetzung, um sinnvolle Ergebnisse zu erhalten.

Hybridmethoden berechnen exakt die Austauschenergie der Slater-Determinanten und verwenden nur für die Elektronenwechselwirkung ein Näherungsfunktional:

$$E_{XC} = E_X^{exact} + E_C^{KS} \quad (4.21)$$

Eine Weiterentwicklung ist der Ansatz von Becke [Bec93], bei dem die Austausch-Korrelationsenergie als Linearkombination (Becke, drei-Parameter-Funktional) angesetzt wird:

$$E_{XC} = E_{XC}^{LSDA} + a_0 (E_X^{exact} - E_X^{LSDA}) + a_x \Delta E_X^{B88} + a_c \Delta E_C^{PW91} \quad (4.22)$$

Die Gleichung enthält die drei semiempirischen Parameter a_0 , a_x und a_c , die an experimentelle Daten angepasst wurden. E_X^{exact} ist die exakte Austauschenergie, die aus der Slater-Determinanten der Kohn-Sham-Orbitale bestimmt wird, E_X^{LSDA} ist die Austauschenergie der Local Spin Density Approximation. ΔE_X^{B88} ist die Gradientenkorrektur für den Austausch von Becke (1988) und ΔE_C^{PW91} die Gradientenkorrektur für die Korrelation von Perdew und Wang (1991).

Seit ihrer Einführung haben die Hybridfunktionale großen Erfolg, der durch die überraschend guten Ergebnisse, die B3LYP und ähnliche Funktionale in vielen chemischen Anwendungen liefern, begründet ist. Insbesondere das B3LYP-Funktional hat sich schnell zum bekanntesten und am häufigsten verwendeten Funktional entwickelt ([Rag00], [KH01]). Es wird in der vorliegenden Arbeit verwendet.

4.1.3 Basissatz

Ein Basissatz ist eine Linearkombination (LCAO = linear combination of atom orbitals) von Funktionen, den sogenannten Basisfunktionen, die verwendet werden, um ein Molekülorbital aufzubauen.

Sowohl in den konventionellen wellenfunktionsbasierten Methoden wie Hartree-Fock oder in variationstheoretischen Ansätzen (CI-Verfahren) als auch in den Dichtefunktionaltheorie-Methoden besteht die Menge vordefinierter Basisfunktionen $\{\eta_\mu\}$ fast immer aus kartesischen Gauß-Funktionen, sogenannten „Gaussian-type-orbitals“ (GTO) in der Form:

$$\eta^{GTO} = N x^l y^m z^n \exp[-\alpha r^2] \quad (4.23)$$

N ist ein Normalisierungsfaktor, l , m und n sind Quantenzahlen, der Orbitalexponent α ist eine Konstante, die die räumliche Ausdehnung der Funktion beschreibt. Der Vorteil von GTO-Basisfunktionen liegt in den sehr effizienten Algorithmen zur Lösung von Mehrzentrenintegralen. Allerdings können Gauß-Funktionen, im Gegensatz zu Slater-Funktionen, aufgrund ihrer r^2 -Abhängigkeit das Orbitalverhalten nicht korrekt beschreiben.

Das Verhalten von Slater-Funktionen ähnelt sowohl in Kernnähe als auch im Verlauf gegen unendlich dem Verhalten von Wasserstofffunktionen. Allerdings sind die Lösungen der auftretenden Mehrzentrenintegrale mit Slater-Funktionen zu aufwändig und spielen deshalb in modernen quantenchemischen Programmen keine Rolle.

Deshalb kommen normalerweise sogenannte „contracted GTO“-Basissätze zum Einsatz, in denen mehrere primitive Gauß-Funktionen über eine Linearkombination zu einer „contracted“ Gauß-Funktion (CGF) zusammengefasst werden.

$$\eta^{CGF} = \sum_a^A d_{a\tau} \eta_a^{GTO} \quad (4.24)$$

Der Kontraktionskoeffizient d wird so gewählt, dass der Verlauf der CGF-Funktion sich so weit wie möglich dem einer einzelnen Slater-Funktion annähert.

Die Wahl des Basissatzes hat entscheidenden Einfluss auf die Qualität der Ergebnisse. Bei der Auswahl einer geeigneten Basis müssen sowohl die Eigenschaften der Atome und Bindungen im zu berechnenden System als auch die benötigte Rechenzeit und die gewünschte Genauigkeit berücksichtigt werden. Es gibt mehrere Arten von Basissätzen, die sich aus verschiedenen Gruppen von Basisfunktionen zusammensetzen:

Minimaler Basissatz

Die einfachste und ungenaueste Möglichkeit ist der sogenannte minimale Basissatz, bei dem jedes Atomorbital nur durch eine kontrahierte Basisfunktion dargestellt wird, die aus drei Gauß-Funktionen zusammengesetzt ist. Da von diesem Basissatz nicht mehr als qualitative Ergebnisse erwartet werden können, wird er heute kaum noch verwendet.

Erweiterte Basissätze

Diese Basissätze beschreiben jedes Atomorbital durch mehrere Basisfunktionen, die jeweils wieder aus einer bestimmten Anzahl von Gauß-Funktionen zusammengesetzt sind. Werden beispielsweise zwei variierbare Basisfunktionen pro Atomorbital verwendet, spricht man von einem double-zeta-Basissatz, bei drei Basisfunktionen von triple-zeta usw. Erweiterte Basissätze ermöglichen eine größere Flexibilität. Durch die unterschiedliche Gewichtung von mehreren Funktionen kann die Ausdehnung eines Atomorbitals besser an die Bindungssituation angepasst werden.

Split-valence-Basissätze

Bei chemischen Prozessen finden die Änderungen in der elektronischen Wellenfunktion nur im Valenzraum statt. Deshalb erhöhen diese Basissätze nur für die Valenzorbitale die Anzahl der verwendeten Funktionen. Die inneren Orbitale werden mit weniger Funktionen beschrieben. Dadurch wird die Radialabhängigkeit nicht schlechter dargestellt, die Rechenzeit aber verkürzt.

Polarisationsfunktionen

Die bisher beschriebenen Basissätze sind bei der Beschreibung von Molekülen, die polare Bindungen enthalten, wie z. B. Aldehyde oder Alkohole, nicht sehr erfolgreich. Polarisationsfunktionen sind Orbitale mit höherer Drehimpulsquantenzahl: Sie verwenden zusätzliche p-Funktionen beim Wasserstoffatom und/oder zusätzliche d-Funktionen bei den schweren Elementen, wie z. B. Kohlenstoffatom und Sauerstoffatom. Per Definition haben Polarisationsfunktionen mehr Winkelknoten-ebenen als besetzte Atomorbitale und stellen dadurch sicher, dass die Orbitale von ihrer ursprünglichen Atomsymmetrie abweichen und sich besser der Molekülumgebung anpassen können.

Polarisierte double-zeta- oder split-valence-Basissätze sind die am meisten verwendeten Basissätze in Standardanwendungen der Quantenchemie, da sie einen guten Kompromiss zwischen Genauigkeit und Recheneffizienz bieten.

Diffuse Funktionen

Durch die Addition von diffusen Funktionen soll das zu steile Abfallen der normalen Gauß-Funktionen kompensiert werden. Dies ist z. B. von Vorteil bei Ionen, angeregten Zuständen oder um schwächere Wechselwirkungen wie Brückenbindungen besser berücksichtigen zu können.

In der Praxis haben sich verschiedene Standardbasissätze durchgesetzt, wie z. B. die Basissätze aus der Arbeitsgruppe von Pople [HRSP86],[DHP71],[HDP72], aber auch die ANO-[AT91], die Karlsruhe- [SHA92], [SHA94] und vor allem die Dunning-Basissätze [Dun89]: cc-pVDZ (correlation-consistent polarized valence double zeta), cc-pVTZ, cc-pVQZ, ...

Im Folgenden wird kurz auf die in der vorliegenden Arbeit verwendeten Basissätze eingegangen: Der Pople-Basissatz 6-31G(d) und der Dunning-Basissatz cc-pVTZ.

6-31G(d)

Die Pople-Basissätze sind die Standardbasissätze des Programmpakets Gaussian und werden nach ihrer Zusammensetzung aus Slater- und Gauß-Funktionen eingeteilt und benannt. Der Bindestrich trennt die Innenschalenorbitale von den Valenzorbitalen. Die Zahl vor dem Bindestrich gibt an, wie viele Gauß-Funktionen zu einer einzigen Basisfunktion kontrahiert werden. Hinter dem Bindestrich stehen bei double-zeta-Basissätzen, wie in diesem Beispiel, zwei weitere Zahlen (bei größeren erweiterten Basissätzen mehr). Diese liefern die gleiche Information für jeden der beiden Typen von Basisfunktionen, die zusammen ein Atomorbital beschreiben sollen. „G“ in der Basissatzbezeichnung steht für Gaussian und die Angabe in

Klammern gibt an, dass der Basissatz durch zusätzliche Polarisationsfunktionen erweitert wird.

Der als Standardbasissatz ausgewählte Basissatz 6-31G(d) ist ein erweiterter split-valence-Basissatz mit Polarisationsfunktionen: Für die Innenschalenorbitale wird ein STO - kontrahiert aus sechs GTOs - und für die Valenzorbitale zwei STOs, von denen das eine aus drei und das andere aus einem GTO gebildet wird, verwendet. Zusätzlich werden für die schweren Elemente wie Kohlenstoff und Sauerstoff Polarisationsfunktionen (d-Funktionen) addiert.

cc-pVTZ

Die „correlation consistent polarized valence“-Basissätze cc-pVnZ ($n = D, T, Q, 5, 6, \dots$) bilden eine Serie von Basissätzen mit wachsender Komplexität. In jeder Stufe werden ganze „Schalen“ von Basisfunktionen addiert. Die Kardinalzahl n gibt die Anzahl der Kontraktionen an, um ein STO zu beschreiben und ist damit nicht nur ein Maß für die Größe des Basissatzes, sondern auch für seine Qualität: Durch die Verwendung von Basissätzen mit größerer Kardinalzahl kann die Korrelationsenergie systematisch verbessert werden. Eine Studie über die Eignung dieser korrelationskonsistenten Basissätze in Kohn-Sham-Berechnungen [RW99] kommt zu dem Ergebnis, dass Kombinationen von B3LYP mit Basissätzen ab cc-pVTZ und größer sehr gute Ergebnisse liefern. In der vorliegenden Arbeit wurde der korrelationskonsistente, polarisierte Valenz-Triple-Zeta-Basissatz cc-pVTZ für ergänzende Rechnungen ausgewählt.

4.1.4 Skalierungsfaktoren

Harmonische Vibrationsfrequenzen, die mit quantenchemischer Software berechnet werden, sind üblicherweise größer als experimentell beobachtete Vibrationsfrequenzen [HRSP86]. Die Hauptursache für diesen Unterschied liegt in der Vernachlässigung von anharmonischen Effekten bei der theoretischen Betrachtung. Außerdem treten Fehler durch die unvollständige Berücksichtigung der Elektronenwechselwirkung und die Verwendung von endlichen Basissätzen auf [SR96]. Da die Überschätzung der berechneten, harmonischen Frequenzen für eine bestimmte theoretische Methode relativ einheitlich ist, werden Skalierungsfaktoren verwendet, um die Abweichungen zu korrigieren. Dadurch kann normalerweise eine gute Übereinstimmung zwischen den berechneten skalierten harmonischen und den experimentell beobachteten anharmonischen Frequenzen erreicht werden. Die Entwicklung von geeigneten Skalierungsfaktoren nimmt an Bedeutung zu (vgl. z. B. [MMR07], [TPR⁺06], [AU05], [CRP05], [SBG⁺04], [Won96], [SR96], [GJS91]).

Abgesehen vom Interesse an den Vibrationsfrequenzen selbst, wird die Berechnung der Nullpunktenergie ZPVE (zero-point vibrational energy) durch die berechneten harmonischen Frequenzen bestimmt. Die Nullpunktenergie wird für die Berechnung von thermodynamischen Eigenschaften benötigt. Die einfachste rechnerische Näherung für die ZPVE eines Moleküls ist (vgl. [SR96]):

$$ZPVE/Nhc = \frac{1}{2} \sum_i \omega_i \quad (4.25)$$

ω_i ist die i-te harmonische Vibrationsfrequenz; Nhc ist die zugehörige Energieumwandlungskonstante.

Da Effekte der Anharmonie nicht berücksichtigt werden, ist dieser Ausdruck nicht exakt, d. h., die einfache Verwendung der berechneten harmonischen Frequenzen bewirkt einen Fehler in der ZPVE. Deshalb werden (vgl. [SR96], [GJS91]) für die Berechnung von Nullpunktvibrationsenergien aus berechneten harmonischen Frequenzen eigene Skalierungsfaktoren benötigt.

4.2 Durchführung der Berechnungen

Für die untersuchten Moleküle wurden verschiedene Startgeometrien (je nach Größe des Moleküls bis zu mehrere Hundert Geometrien) erstellt. Die ausgewählten Dieder-Winkel wurden in 60°-Schritten variiert. Da die ausgewählten Aldehyde und damit auch die entsprechenden Halbacetale z. T. längere Alkylgruppen oder einen Benzolring besitzen, ist die Zahl der möglichen Startgeometrien sehr groß. Daher war es im Rahmen dieser Arbeit nicht möglich, alle Winkelkombinationen zu untersuchen.

In der Literatur (vgl. z. B. [Mor94], [WM89], [Kir83], [WWM79], [JPBV78]) ist zu finden, dass bei Molekülen derselben Stoffgruppe ähnliche Startgeometrien zu den energetisch günstigsten Konformeren führen.

Deshalb wurden die Konformere der kleinen Moleküle analysiert und für größere Moleküle die bereits ermittelten Konformere der kleineren Moleküle verwendet und nur noch die Winkel der neu dazugekommenen Gruppen variiert. Die Berechnungen erfolgten mit Gaussian 03. Ein Beispiel für eine Eingabedatei ist im Anhang (Kap. 8.2.1) angegeben.

Die Vorgehensweise, um die Gleichgewichtskonstante einer Reaktion mit quantenchemischen Methoden zu berechnen, ist in den folgenden Unterkapiteln beschrieben.

4.2.1 Geometrieoptimierung

Die Stabilität eines Konformers eines Moleküls und damit die Häufigkeit seines Auftretens wird durch seine Energie bestimmt: Je niedriger die Energie, umso stabiler ist das Konformer und umso höher ist die Wahrscheinlichkeit, dass dieses Konformer auftritt.

Die Energie eines Moleküls ist eine Funktion seiner Geometrie, d. h. der relativen Anordnung der Atome zueinander. Durch eine sogenannte Potentialenergieoberfläche (potential energy surface) kann die Energie in Abhängigkeit von der Geometrie beschrieben werden. Die Abbildung 4.1 zeigt ein Beispiel für eine Potentialenergieoberfläche eines Moleküls mit zwei Freiheitsgraden.

Jeder Punkt auf der Fläche stellt eine bestimmte Molekülstruktur und die ihr entsprechende Energie dar. Durch die Kenntnis der Potentialenergieoberfläche eines Moleküls kann beurteilt werden, welche der verschiedenen geometrischen Anordnungen zu jenem Konformer führt, das energetisch am günstigsten ist und deshalb am häufigsten vorkommt.

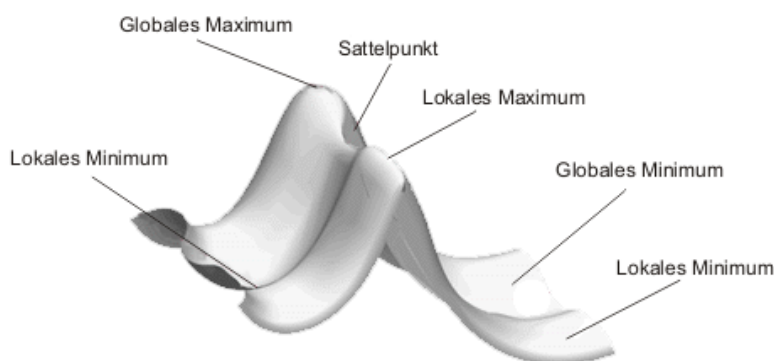


Abbildung 4.1: Potentialenergieoberfläche [Fri]

Die Geometrieoptimierung entspricht einer Energieminimierung: Die Energie der Startgeometrie eines Moleküls wird berechnet und diese Geometrie solange systematisch variiert, bis die Energie ein Minimum annimmt. Wie in der Abbildung 4.1 zu sehen ist, entspricht ein Minimum auf der Potentialenergieoberfläche einer Talsohle. Man unterscheidet zwischen lokalen Minima, die in einer bestimmten Region der Potentialenergieoberfläche den tiefsten Punkt darstellen und dem globalen Minimum, an dem die geringste Energie auf der gesamten Potentialoberfläche erreicht wird. Die verschiedenen Minima entsprechen den unterschiedlichen Konformeren eines Moleküls. Minima treten auf, wenn die berechnete Geometrie eine Gleichgewichtsgeometrie ist, d. h. ein stationärer Punkt erreicht wird.

4.2.2 Frequenzberechnung

Um zu überprüfen, ob die gefundene Geometrie einem Energieminimum entspricht, wird im Anschluss an die Geometrieoptimierung eine Frequenzberechnung durchgeführt. Dabei wird die Art der stationären Punkte auf der Potentialenergieoberfläche bestimmt, indem die zweite Ableitung der Energie nach den Kernkoordinaten der Potentialenergieoberfläche (die Hesse-Matrix) berechnet wird. Ist der stationäre Punkt ein Minimum, erhöht jede Geometrieänderung die Energie, d. h., alle Eigenwerte der Hesse-Matrix sind positiv, es gibt keine negativen (imaginären) Frequenzen.

Zusätzlich liefert die Frequenzberechnung thermodynamische Eigenschaften wie z. B. die freie Gibbsche Energie, die Nullpunktsvibrationsenergie, die Enthalpie und die Entropie.

Frequenzberechnungen dürfen nur an stationären Punkten auf der Potentialenergieoberfläche, d. h. nur an Molekülen mit bereits optimierter Geometrie durchgeführt werden [FF96]. Für die Frequenzberechnung und die Geometrieoptimierung müssen dieselbe quantenchemische Methode und derselbe Basissatz verwendet werden.

4.2.3 Berechnung der Gleichgewichtskonstanten

Die Reaktion



ist im chemischen Gleichgewicht, wenn die Gleichung

$$\Delta_R \mu = \sum_{i=A}^{i=D} \nu_i \mu_i = \alpha \mu_A + \beta \mu_B - \gamma \mu_C - \delta \mu_D = 0 \quad (4.27)$$

erfüllt ist.

$\Delta_R \mu$ ist das chemische Reaktionspotential, μ_i sind die chemischen Potentiale der an der Reaktion teilnehmenden Stoffe (A, B, C und D) und ν_i sind deren stöchiometrische Faktoren ($\alpha, \beta, \gamma, \delta$).

Für das chemische Potential einer Komponente i gilt:

$$\mu_i(T, p) = \mu_i(T, p^\ominus) + RT \ln \left(\frac{p}{p^\ominus} \right) + RT \ln y_i \quad (4.28)$$

y_i sind die Molanteile der Gase in der Mischung, R ist die allgemeine Gaskonstante und p^\ominus der Standarddruck (0,1 MPa). Damit ergibt sich für Gleichung 4.27:

$$\begin{aligned} 0 = & \alpha \left[\mu_A(T, p^\ominus) + RT \ln \left(\frac{p}{p^\ominus} \right) + RT \ln y_A \right] \\ & + \beta \left[\mu_B(T, p^\ominus) + RT \ln \left(\frac{p}{p^\ominus} \right) + RT \ln y_B \right] \\ & - \gamma \left[\mu_C(T, p^\ominus) + RT \ln \left(\frac{p}{p^\ominus} \right) + RT \ln y_C \right] \\ & - \delta \left[\mu_D(T, p^\ominus) + RT \ln \left(\frac{p}{p^\ominus} \right) + RT \ln y_D \right] \end{aligned} \quad (4.29)$$

$$\begin{aligned} \Leftrightarrow & \alpha \left[\mu(T, p^\ominus)_A + RT \ln \left(\frac{p}{p^\ominus} \right) \right] + \beta \left[\mu(T, p^\ominus)_B + RT \ln \left(\frac{p}{p^\ominus} \right) \right] \\ & - \gamma \left[\mu(T, p^\ominus)_C + RT \ln \left(\frac{p}{p^\ominus} \right) \right] - \delta \left[\mu(T, p^\ominus)_D + RT \ln \left(\frac{p}{p^\ominus} \right) \right] \\ & = RT \ln \left(\frac{y_C^\gamma y_D^\delta}{y_A^\alpha y_B^\beta} \right) = RT \ln K_y \end{aligned} \quad (4.30)$$

$$\Leftrightarrow -\frac{\Delta_R \mu(T, p)_{\text{reinesGas}}}{RT} = \ln \left(\frac{y_C^\gamma y_D^\delta}{y_A^\alpha y_B^\beta} \right) = \ln K_y \quad (4.31)$$

Für reine Stoffe ist das chemische Potential μ_i eines Stoffes i gleich seiner molaren Gibbschen Energie g_i . Damit ergibt sich aus Gleichung 4.31:

$$\Leftrightarrow -\frac{\Delta_R g(T, p)_{\text{reinesGas}}}{RT} = \ln \left(\frac{y_C^\gamma y_D^\delta}{y_A^\alpha y_B^\beta} \right) = \ln K_y \quad (4.32)$$

Für die thermodynamische Gleichgewichtskonstante einer Reaktion zwischen idealen Gasen gilt:

$$K_y = \exp \left(-\frac{\Delta_R g(T, p)}{RT} \right) \quad (4.33)$$

$\Delta_R g(T, p)$ ist die Änderung der Gibbschen Reaktionsenergie bei der Temperatur T und dem Druck p . Die Änderung der Gibbschen Reaktionsenergie kann aus folgender Differenz berechnet werden:

$$\Delta_R g(T, p) = \sum \nu_{\text{Produkte}} \cdot g_{\text{Produkte}} - \sum \nu_{\text{Edukte}} \cdot g_{\text{Edukte}} \quad (4.34)$$

Um die Gleichgewichtskonstante einer Reaktion mit quantenchemischen Methoden zu berechnen, müssen die Gibbschen Energien der an der Reaktion beteiligten Stoffe mit quantenchemischen Berechnungen ermittelt werden.

Für detaillierte Informationen über die Gleichungen, die bei der Berechnung der thermodynamischen Daten mit Gaussian G 03 zum Einsatz kommen, wird auf die Literatur (z. B. [Och00] bzw. [SM99]) verwiesen.

4.2.3.1 Berücksichtigung der Konformere

Konformere sind verschiedene, unterschiedlich stabile Strukturen eines Moleküls, die durch Drehung um Einfachbindungen ineinander überführt werden können. Die Berücksichtigung der Konformere eines Moleküls ist notwendig, um die Lage des Gleichgewichts einer Reaktion korrekt vorherzusagen. Deshalb muss festgelegt werden, wie die Konformere der Moleküle eingebunden werden, um die in Gleichung 4.33 benötigte Änderung der Gibbschen Reaktionsenergie $\Delta_R g(T, p)$ zu berechnen.

Eine Vorgehensweise ([Mor94], [BH98]), die Gleichgewichtskonstante zu berechnen, verwendet für jedes an der Reaktion beteiligte Molekül nur das Konformer mit der geringsten Energie.

In der Realität besteht eine Lösung eines Stoffes nicht nur aus dem energetisch günstigsten Konformer, sondern ist eine Mischung aus Konformeren. Aus diesem

Grund wurde in der vorliegenden Arbeit versucht, für die interessierenden Moleküle alle relevanten Konformere zu ermitteln und bei der Berechnung der Gleichgewichtskonstanten zu berücksichtigen. Da die einzelnen Konformere unterschiedliche Energien besitzen, wurde über eine Boltzmann-Verteilung (Gl. 4.35) die Auftrittswahrscheinlichkeit eines Konformers bestimmt:

$$f_i = \frac{\exp\left(-\frac{(e_i - e_0)}{RT}\right)}{\sum_{i=1}^l \exp\left(-\frac{(e_i - e_0)}{RT}\right)} \quad (4.35)$$

f_i ist die Auftrittswahrscheinlichkeit des Konformers n_i , e_i ist die Energie des Konformers i , e_0 ist die Energie des Konformers mit der niedrigsten gefundenen Energie und l ist die Anzahl der berücksichtigten Konformere

Bei der Berechnung der Gleichgewichtskonstanten wurden alle Konformere mit einer Auftrittswahrscheinlichkeit von mindestens 0,01 berücksichtigt. Lag die Summe der Auftrittswahrscheinlichkeiten dieser Konformere unter 0,95 wurden so viele weitere Konformere berücksichtigt, bis diese Grenze erreicht war.

In der Tabelle 4.1 sind beispielhaft für das relativ kleine Molekül 1-Methoxy-1-Propanol (MP) alle 17 ermittelten Konformere mit ihren Energien und Auftrittswahrscheinlichkeiten angegeben. Alle in der vorliegenden Arbeit durchgeführten Berechnungen wurden unter der Annahme idealer Gase für $p = 0,1$ MPa durchgeführt.

Tabelle 4.1: Energien und Boltzmann-Verteilung der Energien für alle ermittelten Konformere von 1-Methoxy-1-Propanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|--------------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Methoxy-1-Propanol - a | -308,88095557 | 0,44456 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - b | -308,88078052 | 0,36933 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - c | -308,87990796 | 0,14658 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - d | -308,87752261 | 0,01172 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - e | -308,87744346 | 0,01078 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - f | -308,87682353 | 0,00559 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - g | -308,87667243 | 0,00476 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - h | -308,87579584 | 0,00188 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - i | -308,87572305 | 0,00174 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - j | -308,87536643 | 0,00119 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - k | -308,87488964 | 0,00072 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - l | -308,87453405 | 0,00049 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - m | -308,87390541 | 0,00025 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - n | -308,87353362 | 0,00017 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - o | -308,87324005 | 0,00013 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - p | -308,87309416 | 0,00011 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - q | -308,86847849 | $8,1 \cdot 10^{-7}$ |

Die Energie wird in Gaussian in E_h/n angegeben. E_h ist die Hartree-Energie, eine physikalische Konstante, die als Bezugssystem für die Einheit der Energie verwendet wird und n ist die Stoffmenge ($1 E_h/n = 627,5095 \text{ kcal/mol}$).

Im Fall von 1-Methoxy-1-Propanol wurden die fünf häufigsten Konformere (MP-a bis MP-e), die zusammen eine Auftrittswahrscheinlichkeit von 0,983 besitzen, berücksichtigt. Anschließend wurden die Faktoren f der ausgewählten Konformere durch Division mit ihrer Gesamtauftrittswahrscheinlichkeit wieder auf eins normiert.

$$f_{l,i} = \frac{f_i}{\sum_{i=1}^l f_i} \quad (4.36)$$

Für das ausgewählte Beispiel ergeben sich die neuen Faktoren f_l aus der Tabelle 4.2.

Tabelle 4.2: Energien und Boltzmann-Verteilung der Energien für die ausgewählten Konformere von 1-Methoxy-1-Propanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|--------------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Methoxy-1-Propanol - a | -308,88095557 | 0,45227 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - b | -308,88078052 | 0,37573 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - c | -308,87990796 | 0,14912 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - d | -308,87752261 | 0,01192 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - e | -308,87744346 | 0,01096 |

Nachdem die Anzahl der Konformere eines Moleküls festgelegt ist, gibt es mehrere Möglichkeiten, die Konformere einzubinden. Folgende drei Varianten werden in der vorliegenden Arbeit verwendet:

In **Variante I** werden nur die Konformere mit der geringsten Energie (e_0) der an der Reaktion teilnehmenden Stoffe berücksichtigt. Die Änderung der Gibbschen Reaktionsenergie erhält man aus:

$$(\Delta_R g(T, p))_{e_0} = \sum \nu_{\text{Produkte}} \cdot (g_{e_0})_{\text{Produkte}} - \sum \nu_{\text{Edukte}} \cdot (g_{e_0})_{\text{Edukte}} \quad (4.37)$$

Für die Gleichgewichtskonstante aus den Konformeren mit der geringsten Energie K_{mE} gilt:

$$K_{mE} = \exp \left(-\frac{(\Delta_R g(T, p))_{e_0}}{RT} \right) \quad (4.38)$$

Variante II wichtet die berechneten Gibbschen Energien aller ausgewählten Konformere mit den berechneten Auftrittswahrscheinlichkeiten f_l , um ein „Ersatzmolekül“ mit einer gemittelten Gibbschen Energie zu erhalten:

$$g_m = \sum_{i=1}^l f_{l,i} \cdot g_i \quad (4.39)$$

Für alle an der Reaktion beteiligten Moleküle wird, sofern mehrere Konformere gefunden wurden, diese gemittelte Gibbsche Energie gebildet und dann die Gleichgewichtskonstante der Reaktion K_{gm} mit der gemittelten Änderung der Gibbschen Reaktionsenergie $(\Delta_R g(T, p))_m$ berechnet:

$$(\Delta_R g(T, p))_m = \sum \nu_{Produkte} \cdot (g_m)_{Produkte} - \sum \nu_{Edukte} \cdot (g_m)_{Edukte} \quad (4.40)$$

$$K_{gm} = \exp \left(-\frac{(\Delta_R g(T, p))_m}{RT} \right) \quad (4.41)$$

In **Variante III** werden die Gleichgewichtskonstanten einer Reaktion für alle Kombinationen der ausgewählten Konformere i berechnet und anschließend die Gleichgewichtskonstanten mit den Auftrittswahrscheinlichkeiten f_m gewichtet, um eine mittlere Gleichgewichtskonstante K_m zu erhalten.

$$K_i = \exp \left(-\frac{\Delta_R g(T, p)_i}{RT} \right) \quad (4.42)$$

$$K_m = \sum_{i=1}^l f_{m,i} \cdot K_i \quad (4.43)$$

Die Auftrittswahrscheinlichkeiten f_m setzen sich aus den Auftrittswahrscheinlichkeiten f_l der an der Reaktion beteiligten Moleküle zusammen:

$$f_{m,i} = \prod_{i=1}^l f_{l,i} \quad (4.44)$$

4.2.4 Verwendete Software

Für die quantenchemischen Berechnungen wurde das Softwarepaket Gaussian in der Version: G 03, Revision C 0.2 [GTS⁺04a] bzw. Revision E 0.1 [GTS⁺04b] der Firma Gaussian Inc. verwendet. Um die benötigten Gaussian-Eingabedateien zu erzeugen, wurde das Programm Molden (Version 4.6 [Sch]) eingesetzt.

4.2.5 Betrachtete Moleküle

Bei den quantenchemischen Berechnungen wurden alle in den NMR-Untersuchungen verwendeten Aldehyde und Alkohole berücksichtigt. Da die quantenchemischen Berechnungen mit zunehmender Größe (Atomanzahl) der Moleküle immer aufwändiger werden, wurden für die Reaktionsprodukte, die in den experimentellen Untersuchungen bestimmt wurden, nur die in der Tabelle 4.3 angegebenen Stoffe behandelt. Alle Berechnungen wurden unter der Annahme idealer Gase für $p = 0,1$ MPa durchgeführt.

Tabelle 4.3: Berechnete Moleküle

| | Methanol | Ethanol | 1-Propanol |
|---------------------------|---------------------------------|--------------------------------|---------------------------------|
| Formaldehyd | Hemiformal | - | - |
| Acetaldehyd | 1-Methoxy-ethanol | 1-Ethoxy-ethanol | 1-Propoxy-ethanol |
| Propanal | 1-Methoxy-1-Propanol | 1-Ethoxy-1-Propanol | 1-Propoxy-1-Propanol |
| Butanal | 1-Methoxy-1-Butanol | 1-Ethoxy-1-Butanol | 1-Propoxy-1-Butanol |
| Heptanal | 1-Methoxy-1-Heptanol | - | - |
| Decanal | 1-Methoxy-1-Decanol | - | - |
| 3-Phenylpropanal | 1-Methoxy-3-Phenyl-1-Propanol | - | - |
| 2-Chlorbenzaldehyd | 1-Methoxy-2-Chlorbenzyl-alkohol | 1-Ethoxy-2-Chlorbenzyl-alkohol | 1-Propoxy-2-Chlorbenzyl-alkohol |

4.2.6 Verwendete Methoden, Basissätze und ausgewählte Rechenparameter

Als quantenchemische Methode wurde ein DFT-Ansatz ausgewählt (vgl. Kapitel 4.1.2.1).

Da aus früheren Arbeiten am Lehrstuhl ([Kuh03], [Alb98]) für die Reaktion von Formaldehyd und Methanol zu Hemiformal experimentelle Daten für die Gleichgewichtskonstante zur Verfügung standen, wurden sowohl Berechnungen für diese Moleküle durchgeführt als auch Literaturergebnisse (z.B. [KH01], [LCH05], [BH98], [FF96]) berücksichtigt, um die quantenchemische Methode und den Basissatz auszuwählen.

Bei den Berechnungen zur Auswahl des DFT-Ansatzes wurden vier gängige DFT-Ansätze jeweils mit fünf verschiedenen großen Basissätzen kombiniert. Die Rechnun-

gen wurden bei 298,15 K durchgeführt. Die Ergebnisse (ausgewertet mit Variante II, vgl. 4.2.3.1) sind in der Tabelle 4.4 zusammengestellt.

Tabelle 4.4: Gleichgewichtskonstanten für die Reaktion von Formaldehyd mit Methanol zu Hemiformal für vier verschiedene DFT-Methoden mit jeweils fünf Basissätzen, berechnet mit Variante II

| Methode / Basissatz | K |
|---------------------|----------------------|
| B3LYP/6-31G(d) | $3,14 \cdot 10^2$ |
| BLYP/6-31G(d) | $2,07 \cdot 10^0$ |
| BP86/6-31G(d) | $1,27 \cdot 10^3$ |
| B3P86/6-31G(d) | $2,50 \cdot 10^5$ |
| B3LYP/6-311G(d) | $1,62 \cdot 10^1$ |
| BLYP/6-311G(d) | $9,80 \cdot 10^{-2}$ |
| BP86/6-311G(d) | $1,17 \cdot 10^2$ |
| B3P86/6-311G(d) | $2,03 \cdot 10^4$ |
| B3LYP/6-311++G(d,p) | $2,44 \cdot 10^{-1}$ |
| BLYP/6-311++G(d,p) | $9,10 \cdot 10^{-4}$ |
| BP86/6-311++G(d,p) | $2,06 \cdot 10^0$ |
| B3P86/6-311++G(d,p) | $5,25 \cdot 10^2$ |
| B3LYP/cc-pVDZ | $1,49 \cdot 10^2$ |
| BLYP/cc-pVDZ | $1,88 \cdot 10^0$ |
| BP86/cc-pVDZ | $6,80 \cdot 10^2$ |
| B3P86/cc-pVDZ | $7,56 \cdot 10^4$ |
| B3LYP/cc-pVTZ | $1,53 \cdot 10^0$ |
| BLYP/cc-pVTZ | $7,59 \cdot 10^{-3}$ |
| BP86/cc-pVTZ | $3,67 \cdot 10^0$ |
| B3P86/cc-pVTZ | $2,55 \cdot 10^3$ |

Die Zahlenwerte für die Gleichgewichtskonstanten, die mit unterschiedlichen quantenchemischen Methoden berechnet wurden, weisen eine große Bandbreite auf: Für den kleinsten gewählten Basissatz 6-31G(d) beträgt beispielsweise der Zahlenwert der Gleichgewichtskonstanten für die Bildung von Hemiformal aus Formaldehyd und Methanol mit der Methode BLYP 2,07, während die Methode B3P86 den Wert $K = 2,50 \cdot 10^5$ liefert. Unabhängig vom gewählten Basissatz werden mit BLYP immer die kleinsten, mit B3P86 immer die größten Zahlenwerte ermittelt. Der Wechsel des Basissatzes bewirkt zwar auch eine deutliche Änderung der Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten K, der Einfluss der quantenchemischen Methode ist aber deutlich größer. Die Werte der Gleichgewichtskonstanten aus der Tabelle 4.4 werden, unabhängig von der Methode, mit größerem Basissatz kleiner. Dies gilt sowohl für die Pople- als auch für die Dunning-Basissätze. Der Zahlenwert der Gleichgewichtskonstanten der Reaktion von Formaldehyd mit Methanol zu Hemiformal bei 298,15 K beträgt laut Kuhnert 435 [Kuh03]. Keine der Kombinationen aus der Tabelle 4.4 ist in der Lage, diesen Zahlenwert korrekt vorherzusagen. Im Anschluss an die Berechnungen wurde als DFT-Ansatz B3LYP ausgewählt, da ei-

nerseits der Zahlenwert für die berechnete Gleichgewichtskonstante ($K = 314$) mit dem relativ kleinen Basissatz 6-31G(d) nahe am experimentell bestimmten Zahlenwert ($K = 435$) liegt, sich andererseits B3LYP als Standard-DFT-Ansatz in der Literatur [KH01] etabliert hat.

Um den geeigneten Basissatz festzulegen, wurde dieser Ansatz mit den in Tabelle 4.5 angegebenen 13 Basissätzen kombiniert. Für vier Basissätze wurden zusätzlich Skalierungsfaktoren für die Nullpunktenergie berücksichtigt, um den Fehler aus der Annahme harmonischer Vibrationsfreiheitsgrade zu kompensieren (vgl. Kapitel 4.1.4). Alle Berechnungen wurden für 298,15 K durchgeführt. Wie

Tabelle 4.5: Gleichgewichtskonstanten für die Reaktion von Formaldehyd mit Methanol zu Hemiformal für B3LYP mit verschiedenen Basissätzen, berechnet mit Variante II

| Basissatz | K |
|------------------|----------------------|
| 6-31G | $4,84 \cdot 10^2$ |
| 6-31G(d) | $3,14 \cdot 10^2$ |
| 6-31G(d) - scale | $3,82 \cdot 10^2$ |
| 6-31G(d,p) | $2,28 \cdot 10^2$ |
| 6-31++G(d,p) | $3,93 \cdot 10^0$ |
| 6-311G | $8,67 \cdot 10^1$ |
| 6-311G(d) | $1,62 \cdot 10^1$ |
| 6-311G(d,p) | $7,08 \cdot 10^0$ |
| 6-311++G(d,p) | $2,44 \cdot 10^{-1}$ |
| cc-pVDZ | $1,49 \cdot 10^2$ |
| cc-pVDZ - scale | $1,59 \cdot 10^2$ |
| aug-cc-pVDZ | $3,08 \cdot 10^0$ |
| cc-pVTZ | $1,53 \cdot 10^0$ |
| cc-pVTZ - scale | $1,71 \cdot 10^0$ |
| aug-cc-pVTZ | $3,86 \cdot 10^{-1}$ |
| cc-pVQZ | $5,39 \cdot 10^{-1}$ |
| cc-pVQZ - scale | $6,02 \cdot 10^{-1}$ |

die Tabelle 4.5 zeigt, hängen die Zahlenwerte für die Gleichgewichtskonstante der Bildung von Hemiformal entscheidend vom gewählten Basissatz ab. Sowohl für die ausgewählten Pople- als auch für die Dunning-Basissätze werden die Zahlenwerte mit größerem Basissatz kleiner. Die Zahlenwerte der berechneten Gleichgewichtskonstanten sind überraschenderweise für die „kleineren“ Basissätze deutlich näher am experimentell gefundenen Wert als für die „größeren“ Basissätze. Da die „kleineren“ Basissätze akzeptable Ergebnisse zu liefern scheinen und auch für größere Moleküle noch akzeptable Rechenzeiten besitzen, wurde als Standardbasissatz für alle in der vorliegenden Arbeit berechneten Moleküle der Pople-Basissatz 6-31G(d) - scale ausgewählt. Zusätzlich wurde für ergänzende Rechnungen, insbesondere für kleinere Moleküle, der Dunning-Basissatz cc-pVTZ - scale ausgewählt, um zu überprüfen, ob dieser Basissatz bei anderen Systemen bessere Ergebnisse liefert. Für

diese Berechnungen wurde wegen des großen Rechenaufwands keine neue Konformersuche durchgeführt, sondern die Konformere, die mit dem Basissatz 6-31G(d) gefunden wurden, wurden mit dem größeren Basissatz neu berechnet. Für beide Basissätze wurden Skalierungsfaktoren (vgl. Kapitel 4.1.4) verwendet: Für den Basissatz 6-31G(d) 0,9804 [Won96] und für den zweiten Basissatz cc-pVTZ 0,9878 [MMR07].

4.3 Ergebnisse

4.3.1 Konformere

Die Tabelle 4.6 zeigt sowohl wie viele stabile Konformere von jedem untersuchten Molekül bestimmt werden konnten als auch die Anzahl der Konformere, die tatsächlich bei der Berechnung der Gleichgewichtskonstanten berücksichtigt wurden. Für das Halbacetal 1-Methoxy-1-Propanol wurden beispielsweise 17 Konformere gefunden und fünf in der weiteren Auswertung berücksichtigt.

Tabelle 4.6: Anzahl der gefundenen und der verwendeten Konformere

| Untersuchte Stoffe | Gefundene Konformere | Verwendete Konformere |
|--------------------------------|----------------------|-----------------------|
| Acetaldehyd | 1 | 1 |
| Propanal | 3 | 2 |
| Butanal | 4 | 4 |
| Heptanal | 11 | 10 |
| Decanal | 12 | 11 |
| 3-Phenylpropanal | 6 | 5 |
| 2-Chlorbenzaldehyd | 2 | 1 |
| Methanol | 1 | 1 |
| Ethanol | 2 | 2 |
| 1-Propanol | 6 | 6 |
| 1-Methoxy-1-Ethanol | 6 | 5 |
| 1-Ethoxy-1-Ethanol | 17 | 5 |
| 1-Propoxy-1-Ethanol | 23 | 8 |
| 1-Methoxy-1-Propanol | 17 | 5 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol | 26 | 9 |
| 1-Propoxy-1-Propanol | 58 | 17 |
| 1-Methoxy-1-Butanol | 28 | 8 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol | 49 | 23 |
| 1-Propoxy-1-Butanol | 53 | 21 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol | 58 | 25 |
| 1-Methoxy-1-Decanol | 58 | 31 |
| 1-Methoxy-3-Phenyl-1-Propanol | 12 | 3 |
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol | 21 | 5 |
| 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol | 19 | 10 |
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol | 26 | 9 |

4.3.2 Gleichgewichtskonstanten der ausgewählten Reaktionen

Die Zahlenwerte der berechneten Gleichgewichtskonstanten für 298 K und 0,1 MPa sind im folgenden Kapitel zusammengefasst. Aus zeitlichen Gründen wurde nur die Gleichgewichtskonstante für die Bildung von Halbacetal 1 berechnet. Es werden die Ergebnisse für alle drei gewählten Varianten dargestellt.

4.3.2.1 B3LYP 6-31G(d) scale

Die Tabelle 4.7 zeigt einen Überblick über die Gleichgewichtskonstanten der ausgewählten Reaktionen, die mit B3LYP 6-31G(d) scale für alle drei Varianten berechnet wurden.

Variante I berechnet die Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten aus den Konformeren mit der geringsten Energie, Variante II aus den gemittelten Gibbschen Energien und Variante III aus den Gleichgewichtskonstanten aller möglichen Konformerkombinationen (vgl. Kap. 4.2.3.1).

Tabelle 4.7: Gleichgewichtskonstanten K für alle drei Varianten, B3LYP 6-31G(d) scale (T = 298 K, p = 0,1 MPa)

| V | | Acet- aldehyd | Propanal | Butanal | Heptanal | Decanal | 3-Phenyl- propanal | 2-Chlor- benzaldehyd |
|-----|------------|------------------|----------|---------|----------|---------|-----------------------|-------------------------|
| I | Methanol | 0,089 | 0,585 | 0,097 | 0,094 | 0,082 | 0,106 | $1,29 \cdot 10^{-4}$ |
| I | Ethanol | 0,043 | 0,098 | 0,016 | - | - | - | $2,23 \cdot 10^{-5}$ |
| I | 1-Propanol | 0,034 | 0,075 | 0,013 | - | - | - | $1,54 \cdot 10^{-5}$ |
| II | Methanol | 0,072 | 0,026 | 0,029 | 0,024 | 0,016 | 0,047 | $2,21 \cdot 10^{-5}$ |
| II | Ethanol | 0,026 | 0,009 | 0,010 | - | - | - | $8,86 \cdot 10^{-6}$ |
| II | 1-Propanol | 0,024 | 0,010 | 0,015 | - | - | - | $1,32 \cdot 10^{-5}$ |
| III | Methanol | 0,084 | 0,716 | 0,135 | 0,272 | 0,198 | 0,280 | $9,24 \cdot 10^{-5}$ |
| III | Ethanol | 0,036 | 0,106 | 0,020 | - | - | - | $1,50 \cdot 10^{-5}$ |
| III | 1-Propanol | 0,034 | 0,106 | 0,023 | - | - | - | $1,71 \cdot 10^{-5}$ |

Alle berechneten Zahlenwerte für K sind mit Variante I kleiner als eins, d. h., das Gleichgewicht liegt auf der Seite der Edukte. Der größte Zahlenwert der Gleichgewichtskonstanten wird für die Reaktion des aliphatischen Aldehyds Propanal mit Methanol zu 1-Methoxy-1-Propanol erhalten (0,585). Bei einer äquimolaren Einsatzmischung aus Propanal und Methanol betragen die Molanteile der beiden Ausgangsstoffe im Reaktionsgleichgewicht 0,4427 und von 1-Methoxy-1-Propanol 0,1146. Die Reaktion des aromatischen Aldehyds 2-Chlorbenzaldehyd mit 1-Propanol besitzt den kleinsten Wert der Gleichgewichtskonstanten ($1,54 \cdot 10^{-5}$), d. h., diese Reaktion läuft am unvollständigsten ab. Bei einer äquimolaren Einsatzmischung aus 2-Chlorbenzaldehyd und 1-Propanol beträgt der Molanteil von 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol im Reaktionsgleichgewicht nur $3,84 \cdot 10^{-5}$, d. h., der Umsatz der Reaktion ist vernachlässigbar klein. Die Gleichgewichtskonstante der Reaktion von Propanal mit Methanol ist um den Faktor 5,5 größer als der Zahlenwert der

Reaktion von 3-Phenylpropanal mit Methanol, d. h., die Substitution eines Wasserstoffatoms durch den aromatischen Ring bewirkt eine geringere Reaktivität.

Abgesehen von den Reaktionen mit Acetaldehyd, nehmen die Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten mit steigender Alkylkettenlänge der Aldehyde ab. Mit steigender Kettenlänge des Alkohols nimmt die Reaktivität bei allen untersuchten Systemen ab.

Die Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten, die mit Variante II berechnet wurden, sind alle deutlich kleiner als die Ergebnisse von Variante I, d. h., das Gleichgewicht der Reaktionen liegt noch mehr auf der Seite der Edukte.

Die Reaktion des kleinsten Aldehydmoleküls (Acetaldehyd) mit Methanol (kleinstes Alkoholmolekül) verläuft am vollständigsten, da sich für die Bildung des 1-Methoxyethanols die größte Gleichgewichtskonstante ($K = 0,072$) ergibt. Eine äquimolare Einsatzmischung aus Acetaldehyd und Methanol liefert im chemischen Gleichgewicht für die Edukte einen Molanteil von 0,4913 und für das Produkt 1-Methoxyethanol einen Molanteil von 0,0174. Der geringste Umsatz ($K = 8,86 \cdot 10^{-6}$) wird für die Bildung von 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol beobachtet. Bei einer äquimolaren Mischung aus 2-Chlorbenzaldehyd und Ethanol beträgt der Molanteil von 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol im Reaktionsgleichgewicht lediglich $2,21 \cdot 10^{-6}$. Der Zahlenwert der Gleichgewichtskonstanten der Reaktion von 3-Phenylpropanal mit Methanol ist mit 0,047 etwa doppelt so groß wie der Wert der Reaktion von Propanal mit Methanol zu 1-Methoxy-1-Propanol (0,026). Bei der Auswertung mit Variante II bewirkt die Substitution des Wasserstoffatoms durch den aromatischen Ring, im Gegensatz zu Variante I, eine höhere Reaktivität. Die Reaktivität der untersuchten Systeme nimmt mit steigender Alkylkettenlänge der aliphatischen Aldehyde tendenziell ab. Bei allen untersuchten Systemen werden die größten Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten (wie erwartet) mit dem kleinsten Alkoholmolekül Methanol erreicht.

Mit Variante III werden für die Reaktionsgemische mit Propanal, Butanal, Heptanal und Decanal die größten Gleichgewichtskonstanten berechnet. Für die Systeme mit Acetaldehyd und 2-Chlorbenzaldehyd sind die Werte der Gleichgewichtskonstanten mit Variante III kleiner als die mit Variante I, aber größer als die mit Variante II berechneten Werte.

Der größte Umsatz wird mit Variante III für die Reaktion von Propanal mit Methanol zu 1-Methoxy-1-Propanol bestimmt. Eine äquimolare Mischung aus Aldehyd und Alkohol liefert für die Edukte einen Molanteil von 0,4329 und für 1-Methoxy-1-Propanol einen Molanteil von 0,1342. Die Gleichgewichtskonstante dieser Reaktion beträgt 0,716 und ist etwa 50.000 mal größer als der kleinste Wert der Gleichgewichtskonstanten ($1,50 \cdot 10^{-6}$), der für die Bildung von 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol berechnet wird. Bei einer äquimolaren Einsatzmischung aus 2-Chlorbenzaldehyd und Ethanol beträgt der Molanteil von 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol nur $3,74 \cdot 10^{-6}$, d. h., der Umsatz dieser Reaktion ist vernachlässigbar klein. Die Gleichgewichtskonstante der Reaktion von Propanal mit Methanol ist ungefähr doppelt so groß, wie die der Reaktion von 3-Phenylpropanal mit Methanol. Die Reaktionen der Aldehyde mit Methanol besitzen die größte Reaktivität.

Die Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten sind für alle drei Auswertungsvarianten kleiner als eins, d. h., das Gleichgewicht der Reaktionen liegt immer auf der Seite der Edukte. Insbesondere die Mischungen aus 2-Chlorbenzaldehyd mit Alkohol besitzen, unabhängig von der Auswertungsvariante, so kleine Werte der Gleichgewichtskonstanten ($K \leq 1,29 \cdot 10^{-4}$), dass die Umsätze dieser Reaktion vernachlässigbar klein sind.

Den geringsten Einfluss haben die verschiedenen Varianten auf die Systeme mit Acetaldehyd. Für die Reaktion von Acetaldehyd mit Methanol zu 1-Methoxyethanol sind z. B. die Unterschiede in den Zahlenwerten der Gleichgewichtskonstanten gering: $K = 0,089$ (Variante I), $K = 0,072$ (Variante II) und $K = 0,084$ (Variante III). Die Abweichungen zum Mittelwert der K -Werte liegen hier im Bereich von $\pm_{12}^8\%$.

Die unterschiedlichen Varianten können aber auch zu sehr großen Unterschieden in den Zahlenwerten der Gleichgewichtskonstanten führen. Für die Reaktion von Propanal mit Methanol zu 1-Methoxy-1-Propanol ergibt sich z. B. eine große Bandbreite für die Gleichgewichtskonstanten: $K = 0,585$ (Variante I), $K = 0,026$ (Variante II) und $K = 0,716$ (Variante III). Die Reaktivität von Propanal mit Methanol ist mit Variante I etwa 5,5 mal größer, mit Variante II ungefähr halb so groß und mit Variante III etwa doppelt so groß wie die Reaktivität von 3-Phenylpropanal mit Methanol. Die Gleichgewichtskonstante der Reaktion von Acetaldehyd mit Methanol zu 1-Methoxyethanol ist nur für den Fall, dass die Gleichgewichtskonstanten mit Variante II berechnet wurden, wie erwartet, am größten. In den Auswertungen mit Variante I bzw. Variante III (siehe Tabelle 4.7) besitzt die Reaktion von Propanal mit Methanol zu 1-Methoxy-1-Propanol die größte Reaktivität. Die in den experimentellen Gleichgewichtskonstanten beobachtete Tendenz, dass mit steigender Alkylkettenlänge des Aldehyds der Zahlenwert der Gleichgewichtskonstanten abnimmt, kann nur mit Variante II beobachtet werden. Der Austausch des Alkohols von Methanol durch Ethanol führt in allen drei Varianten zu einem deutlich kleineren Wert der Gleichgewichtskonstanten (Faktor ≈ 2). Der Wechsel von Ethanol auf 1-Propanol besitzt fast keinen Einfluss auf die Zahlenwerte.

4.3.2.2 B3LYP cc-pVTZ scale

Für die Berechnung der Gleichgewichtskonstanten mit dem größeren Basissatz B3LYP cc-pVTZ scale wurden aus Zeitgründen für einige (größere) Moleküle nur die Konformere mit der geringsten Energie berechnet.

Die Ergebnisse sind in der Tabelle 4.8 für alle drei Varianten zusammengefasst. Variante I berechnet die Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten aus den Konformeren mit der geringsten Energie, Variante II aus den gemittelten Gibbschen Energien und Variante III aus den Gleichgewichtskonstanten aller möglichen Konformerkombinationen (vgl. Kap. 4.2.3.1). Da für Variante I nur das energetisch günstigste Konformer von jedem Molekül mit dem rechenintensiven Basissatz cc-pVTZ scale berechnet werden muss, wurden alle Reaktionen, die auch mit dem kleinen Basissatz 6-31G(d) scale behandelt wurden, untersucht.

Die Reaktion von Acetaldehyd mit Methanol zu 1-Methoxyethanol besitzt von allen untersuchten Reaktionen die größte Reaktivität mit dem Zahlenwert der Gleichgewichtskonstanten $1,90 \cdot 10^{-4}$. Im Reaktionsgleichgewicht liefert eine äqui-

Tabelle 4.8: Gleichgewichtskonstanten K für alle drei Varianten, B3LYP cc-pVTZ scale ($T = 298,15$ K, $p = 0,1$ MPa)

| V | | Acet- aldehyd | Propanal | Butanal | Heptanal | Decanal | 3-Phenyl- propanal | 2-Chlor- benzaldehyd |
|-----|------------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|-----------------------|-------------------------|
| I | Methanol | $1,90 \cdot 10^{-4}$ | $7,08 \cdot 10^{-5}$ | $8,09 \cdot 10^{-5}$ | $7,82 \cdot 10^{-5}$ | $6,76 \cdot 10^{-5}$ | $8,94 \cdot 10^{-5}$ | $1,75 \cdot 10^{-7}$ |
| I | Ethanol | $1,02 \cdot 10^{-4}$ | $3,68 \cdot 10^{-5}$ | $4,11 \cdot 10^{-5}$ | - | - | - | $9,51 \cdot 10^{-8}$ |
| I | 1-Propanol | $8,37 \cdot 10^{-5}$ | $2,77 \cdot 10^{-5}$ | $2,86 \cdot 10^{-5}$ | - | - | - | $6,86 \cdot 10^{-8}$ |
| II | Methanol | $1,45 \cdot 10^{-4}$ | $5,53 \cdot 10^{-5}$ | $6,98 \cdot 10^{-5}$ | - | - | - | $9,17 \cdot 10^{-8}$ |
| II | Ethanol | $5,69 \cdot 10^{-5}$ | $2,61 \cdot 10^{-5}$ | - | - | - | - | - |
| II | 1-Propanol | $6,78 \cdot 10^{-5}$ | $3,03 \cdot 10^{-5}$ | - | - | - | - | - |
| III | Methanol | $1,76 \cdot 10^{-4}$ | $8,42 \cdot 10^{-5}$ | $1,08 \cdot 10^{-4}$ | - | - | - | $1,29 \cdot 10^{-7}$ |
| III | Ethanol | $7,89 \cdot 10^{-5}$ | $4,12 \cdot 10^{-5}$ | - | - | - | - | - |
| III | 1-Propanol | $8,20 \cdot 10^{-5}$ | $3,10 \cdot 10^{-5}$ | - | - | - | - | - |

molare Mischung der Edukte einen Molanteil des Produktes von $4,76 \cdot 10^{-5}$, d. h., selbst der Umsatz der Reaktion mit der größten Reaktivität der untersuchten Systeme ist vernachlässigbar klein. Die Reaktion des aromatischen Aldehyds 2-Chlorbenzaldehyd mit 1-Propanol zu 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol hat mit $K = 6,86 \cdot 10^{-8}$ die geringste Reaktivität. Der Molanteil von 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol beträgt im Reaktionsgleichgewicht der äquimolaren Einsatzmischung von 2-Chlorbenzaldehyd und 1-Propanol bei 298,15 K nur $1,86 \cdot 10^{-8}$.

Der Wechsel des Aldehyds von Acetaldehyd zu Propanal bewirkt bei gleichbleibendem Alkohol eine deutliche Abnahme der Reaktivität. Eine weitere Verlängerung der Alkylkette des Aldehyds hat im Gegensatz dazu fast keinen Einfluss mehr auf den Wert der Gleichgewichtskonstanten. Mit steigender Alkylkettenlänge des Alkohols nimmt die Reaktivität in allen untersuchten Fällen ab. Der Wechsel von Methanol auf Ethanol bewirkt einen deutlich größeren Einfluss auf die Reaktivität als der Wechsel von Ethanol auf 1-Propanol.

Die Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten, die mit Variante II berechnet wurden, sind etwas kleiner als die Ergebnisse mit Variante I (vgl. Tabelle 4.8). Von den berechneten Reaktionen läuft die Reaktion von Acetaldehyd mit Methanol zu 1-Methoxyethanol am stärksten ab ($K = 1,45 \cdot 10^{-4}$). Eine äquimolare Mischung aus Acetaldehyd und Methanol führt im chemischen Gleichgewicht für 1-Methoxyethanol zu einem Molanteil von $3,61 \cdot 10^{-5}$, der Reaktionsumsatz ist damit vernachlässigbar klein. Der Molanteil von 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol beträgt im Reaktionsgleichgewicht bei einer äquimolaren Einsatzmischung von 2-Chlorbenzaldehyd und Methanol $2,24 \cdot 10^{-8}$ ($K = 9,17 \cdot 10^{-8}$). Die Zunahme der Alkylkette des Aldehyds bewirkt in der Reaktion mit Methanol eine Abnahme der Gleichgewichtskonstanten. Beim Wechsel des Alkohols bei gleichbleibendem Aldehyd werden mit dem kleinsten Alkohol Methanol die größten Zahlenwerte für die Gleichgewichtskonstanten berechnet.

Die Werte der Gleichgewichtskonstanten mit Variante III sind für die Systeme mit Acetaldehyd und das System aus 2-Chlorbenzaldehyd und Methanol kleiner als die mit Variante I erhaltenen Zahlenwerte, aber größer als die Zahlenwerte bei der

Verwendung von Variante II. Für die Systeme mit Propanal und das System aus Butanal und Methanol sind die ermittelten Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten mit Variante III am größten.

Wie bei den beiden anderen Varianten, besitzt die Reaktion von Acetaldehyd mit Methanol zu 1-Methoxyethanol die größte Reaktivität ($1,76 \cdot 10^{-4}$). Dies entspricht einem Molanteil von 1-Methoxyethanol bei einer äquimolaren Einsatzmischung der Edukte im Gleichgewicht von $4,39 \cdot 10^{-5}$. Die kleinste Reaktivität wird für die Bildung von 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol ermittelt ($K = 1,29 \cdot 10^{-7}$). Bei einer äquimolaren Mischung von 2-Chlorbenzaldehyd und Methanol beträgt der Molanteil von 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol im Reaktionsgleichgewicht $3,17 \cdot 10^{-8}$, d. h., der Umsatz der Reaktion ist vernachlässigbar klein.

Die Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten sind, unabhängig von der gewählten Auswertungsvariante, für alle untersuchten Reaktionen sehr viel kleiner als eins. Das Gleichgewicht liegt auf der Seite der Edukte, die Reaktionen laufen praktisch nicht ab. Mit allen drei Varianten ist die Reaktivität der Reaktion von Acetaldehyd und Methanol zu 1-Methoxyethanol am größten und die Reaktivität der Mischungen mit 2-Chlorbenzaldehyd am kleinsten.

Die verschiedenen Varianten führen mit dem Dunning-Basisatz (cc-pVTZ scale) zwar auch zu unterschiedlichen Werten der Gleichgewichtskonstanten, aber die Unterschiede sind, insbesondere für die größeren Aldehyde, deutlich geringer als mit dem Pople-Basisatz (6-31G(d) scale). Für das System mit Acetaldehyd betragen die Unterschiede der berechneten Zahlenwerte mit den drei Varianten von einem gemittelten K-Wert bis zu $\pm \frac{12}{15}\%$, für das System mit 2-Chlorbenzaldehyd liegen die Abweichungen im Bereich von $\pm 30\%$.

Für alle untersuchten Reaktionen gilt, dass die Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten mit cc-pVTZ scale für die ausgewählten Beispiele deutlich kleiner sind als die mit dem kleineren Pople-Basisatz 6-31G(d) scale.

4.3.3 Einfluss der Temperatur auf die Gleichgewichtskonstante

Die Halbacetalbildung ist eine exotherme Reaktion. Bei exothermen Reaktionen verschiebt sich die Lage des Gleichgewichts mit abnehmender Temperatur auf die Seite der Produkte: Es wird bei tieferen Temperaturen mehr Produkt gebildet als bei hohen Temperaturen, d. h., eine Temperaturerniedrigung bewirkt einen größeren Zahlenwert der Gleichgewichtskonstanten.

Aus zeitlichen Gründen wurde der Temperatureinfluss auf die Gleichgewichtskonstante nur für die in der Tabelle 4.9 ausgewählten Beispiele mit dem Pople-Basisatz 6-31G(d) scale untersucht. Die Berechnungen fanden in der Gasphase bei 273,15 K und $p = 0,1$ MPa statt.

Die Tabelle 4.9 zeigt die Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten, die für die drei Varianten berechnet wurden.

Der Wechsel der Temperatur ändert nichts an den zuvor getroffenen Aussagen für die Tendenzen der Gleichgewichtskonstanten bei 298 K: Mit steigender Alkylkettenlänge des Aldehyds nimmt bei gleichbleibendem Alkohol der Zahlenwert der Gleichgewichtskonstanten ab. Der Wechsel des Alkohols von Methanol auf Ethanol

Tabelle 4.9: Gleichgewichtskonstanten K für alle drei Varianten, B3LYP 6-31G(d) scale (T = 273,15 K, p = 0,1 MPa)

| V | | Acetaldehyd | Butanal | Decanal | 3-Phenylpropanal | 2-Chlorbenzaldehyd |
|-----|------------|-------------|---------|---------|------------------|----------------------|
| I | Methanol | 0,526 | 0,195 | 0,166 | 0,213 | $2,50 \cdot 10^{-4}$ |
| I | Ethanol | 0,248 | - | - | - | - |
| I | 1-Propanol | 0,200 | - | - | - | - |
| II | Methanol | 0,427 | 0,172 | 0,094 | 0,275 | $1,28 \cdot 10^{-4}$ |
| II | Ethanol | 0,150 | - | - | - | - |
| II | 1-Propanol | 0,143 | - | - | - | - |
| III | Methanol | 0,498 | 0,271 | 0,377 | 0,554 | $1,80 \cdot 10^{-4}$ |
| III | Ethanol | 0,211 | - | - | - | - |
| III | 1-Propanol | 0,199 | - | - | - | - |

nol bewirkt einen deutlich kleineren Zahlenwert der Gleichgewichtskonstanten, der Wechsel von Ethanol auf 1-Propanol übt fast keinen Einfluss aus. Die tiefere Temperatur hat ebenfalls fast keinen Einfluss auf die Unterschiede in den drei Varianten. Für das System aus Acetaldehyd und Methanol beträgt beispielsweise die Abweichung zum Mittelwert der K-Werte zwischen den Varianten, wie bei 298 K, $\pm 8_{12}\%$ (vgl. Kap. 4.3.2.1).

In der Auswertung mit Variante I läuft von den untersuchten Reaktionen die Reaktion von Acetaldehyd mit Methanol zu 1-Methoxyethanol am vollständigsten ab ($K = 0,526$). Bei einer äquimolaren Mischung von Acetaldehyd und Methanol betragen die Molanteile im chemischen Gleichgewicht für die Edukte 0,4473 und für 1-Methoxyethanol 0,1054. Der Umsatz bei der Reaktion zur Bildung von 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol ist mit $K = 2,50 \cdot 10^{-4}$ am geringsten. Eine äquimolare Mischung aus 2-Chlorbenzaldehyd und Methanol enthält im Gleichgewicht einen Molanteil von $6,25 \cdot 10^{-5}$ 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol. Sowohl mit steigender Alkylkettenlänge des Aldehyds mit Methanol als auch bei steigender Alkylkettenlänge des Alkohols mit Acetaldehyd nimmt der Zahlenwert der Gleichgewichtskonstanten ab.

Die Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten sind mit Variante II, bis auf die Reaktion von 3-Phenylpropanal mit Methanol, kleiner als die Werte, die mit Variante I berechnet wurden. Die Reaktivität von Acetaldehyd mit Methanol ist mit $K = 0,427$ am größten und ergibt für eine äquimolare Einsatzmischung im Reaktionsgleichgewicht für die Edukte einen Molanteil von 0,4557 und für das Produkt 1-Methoxyethanol einen Molanteil von 0,0886. Die Affinität von 2-Chlorbenzaldehyd mit Methanol ist am geringsten ($K = 1,28 \cdot 10^{-4}$). Im chemischen Gleichgewicht beträgt der Molanteil von 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol $3,19 \cdot 10^{-5}$ bei einer äquimolaren Mischung aus 2-Chlorbenzaldehyd und Methanol. Je größer die Alkylkette des aliphatischen Aldehyds in der Reaktion mit Methanol ist, umso kleiner ist der Wert der Gleichgewichtskonstanten. Die Reaktivität der Lösungen aus Acetaldehyd und Alkohol nimmt mit steigender Alkylkettenlänge des Alkohols ab.

Mit Variante III sind die Werte der Gleichgewichtskonstanten für die Reaktionen mit Butanal, Decanal und 3-Phenylpropanal mit Methanol am größten. Für die Systeme mit Acetaldehyd und das System aus 2-Chlorbenzaldehyd und Methanol sind die Werte kleiner als mit Variante I, aber größer als mit Variante II. Den größten K-Wert (0,498) besitzt die Reaktion von Acetaldehyd mit Methanol zu 1-Methoxyethanol. Eine äquimolare Mischung der Edukte liefert im chemischen Gleichgewicht einen Molanteil des Produkts von 0,1008. Den kleinsten K-Wert ($1,80 \cdot 10^{-4}$) liefert die Reaktion von 2-Chlorbenzaldehyd mit Methanol zu 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol. Das ergibt für eine äquimolare Einsatzmischung von 2-Chlorbenzaldehyd und Methanol im Reaktionsgleichgewicht für 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol einen Molanteil von $4,50 \cdot 10^{-5}$, d. h., der Umsatz ist vernachlässigbar klein. Die Werte der Gleichgewichtskonstanten sind mit steigender Alkylkettenlänge des Aldehyds uneinheitlich; mit steigender Kettenlänge des Alkohols in Kombination mit Acetaldehyd nehmen sie ab.

Die Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten sind für alle drei Varianten kleiner als eins, d. h., das Gleichgewicht liegt auf der Seite der Edukte. Die Gleichgewichtskonstanten sind aber, unabhängig von der Variante, bei der tieferen Temperatur 273,15 K deutlich größer als bei 298,15 K. Die verschiedenen Varianten führen mit dem Basissatz 6-31G(d) scale bei 273,15 K zwar zu unterschiedlichen Zahlenwerten der Gleichgewichtskonstanten, aber die Unterschiede sind sehr viel geringer als bei 298,15 K. Außerdem besitzt bei 273,15 K, unabhängig von der Variante, immer die Reaktion von Acetaldehyd mit Methanol zu 1-Methoxyethanol die größte Reaktivität. Bei 298,15 K besitzt die Mischung aus Acetaldehyd und Methanol nur für die Auswertung mit Variante II die größte Reaktivität. Mit Variante I und Variante III werden bei 298,15 K für die Reaktion von Propanal mit Methanol zu 1-Methoxy-1-Propanol die größten Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten berechnet.

Da Acetaldehyd, als kleinster ausgewählter Aldehyd, die größte Reaktivität besitzt und die Rechenzeiten der damit gebildeten Halbacetalmoleküle am kürzesten sind, wurden mit den Systemen aus Acetaldehyd und den ausgewählten Alkoholen zusätzliche Berechnungen bei tieferen Temperaturen durchgeführt. Die Tabelle 4.10 zeigt einen Überblick über alle berechneten Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten für Reaktionen mit Acetaldehyd für alle drei Varianten. Sowohl mit dem kleinen Basissatz 6-31G(d) scale als auch mit dem großen Basissatz cc-pVTZ scale steigen für alle drei Varianten die Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten mit sinkender Reaktionstemperatur, wie erwartet, stark an.

In der Auswertung mit Variante II steigt beispielsweise der Molanteil von 1-Methoxyethanol mit dem Basissatz 6-31G(d) scale bei einer äquimolaren Einsatzmischung aus Acetaldehyd und Methanol im Reaktionsgleichgewicht von 0,017 bei 298,15 K ($K = 0,072$) über 0,089 bei 273,15 K ($K = 0,427$) auf 0,288 bei 253,15 K ($K = 2,279$) deutlich an.

Mit dem Basissatz cc-pVTZ steigt der Molanteil des Produkts im chemischen Gleichgewicht für Variante II bei einer äquimolaren Mischung aus Acetaldehyd ebenfalls an, aber nicht so stark wie mit dem kleineren Basissatz: $3,61 \cdot 10^{-5}$ bei 298,15 K, $2,14 \cdot 10^{-4}$ bei 273,15 K und $1,14 \cdot 10^{-3}$ bei 253,15 K.

Tabelle 4.10: Gleichgewichtskonstanten K für alle Rechnungen mit Acetaldehyd für drei Varianten (B3LYP 6-31G(d) scale, p = 0,1 MPa)

| V | T | Basissatz | Methanol | Ethanol | 1-Propanol |
|-----|--------|----------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| I | 298,15 | 6-31G(d) scale | 0,089 | 0,043 | 0,034 |
| I | 273,15 | 6-31G(d) scale | 0,526 | 0,248 | 0,199 |
| I | 253,15 | 6-31G(d) scale | 2,811 | - | - |
| I | 298,15 | cc-pVTZ scale | $1,904 \cdot 10^{-4}$ | $1,023 \cdot 10^{-4}$ | $8,373 \cdot 10^{-5}$ |
| I | 273,15 | cc-pVTZ scale | $1,130 \cdot 10^{-3}$ | $6,003 \cdot 10^{-4}$ | $4,925 \cdot 10^{-4}$ |
| I | 253,15 | cc-pVTZ scale | $6,003 \cdot 10^{-3}$ | - | - |
| II | 298,15 | 6-31G(d) scale | 0,072 | 0,026 | 0,024 |
| II | 273,15 | 6-31G(d) scale | 0,427 | 0,150 | 0,143 |
| II | 253,15 | 6-31G(d) scale | 2,279 | - | - |
| II | 298,15 | cc-pVTZ scale | $1,455 \cdot 10^{-4}$ | $5,686 \cdot 10^{-5}$ | $6,776 \cdot 10^{-5}$ |
| II | 273,15 | cc-pVTZ scale | $8,574 \cdot 10^{-4}$ | $3,375 \cdot 10^{-4}$ | $4,038 \cdot 10^{-4}$ |
| II | 253,15 | cc-pVTZ scale | $4,554 \cdot 10^{-3}$ | - | - |
| III | 298,15 | 6-31G(d) scale | 0,084 | 0,036 | 0,034 |
| III | 273,15 | 6-31G(d) scale | 0,498 | 0,211 | 0,199 |
| III | 253,15 | 6-31G(d) scale | 2,662 | - | - |
| III | 298,15 | cc-pVTZ scale | $1,756 \cdot 10^{-4}$ | $7,984 \cdot 10^{-5}$ | $8,203 \cdot 10^{-5}$ |
| III | 273,15 | cc-pVTZ scale | $1,042 \cdot 10^{-3}$ | $4,716 \cdot 10^{-4}$ | $4,870 \cdot 10^{-4}$ |
| III | 253,15 | cc-pVTZ scale | $5,536 \cdot 10^{-3}$ | - | - |

Für beide Basissätze gilt, unabhängig von der Temperatur und der gewählten Variante, dass der Wechsel des Alkohols von Methanol auf Ethanol eine deutliche Abnahme des Zahlenwertes der Gleichgewichtskonstanten bewirkt. Der Wechsel des Alkohols von Ethanol auf 1-Propanol hat nur einen geringen Einfluss auf den Wert der Gleichgewichtskonstanten.

5 Vergleich und Bewertung von Experiment und Rechnung

5.1 Umrechnung der experimentell bestimmten Pseudogleichgewichtskonstanten K_x auf die Gleichgewichtskonstante K

Die experimentell bestimmten Gleichgewichtskonstanten sind konzentrationsabhängige „Pseudogleichgewichtskonstanten“ K_x . Diese können mit Gleichung 5.1 in konzentrationsunabhängige Gleichgewichtskonstanten K umgewandelt werden:

$$K = K_x \cdot K_\gamma = \frac{\prod x_{\text{Produkte}}}{\prod x_{\text{Edukte}}} \cdot \frac{\prod \gamma_{\text{Produkte}}}{\prod \gamma_{\text{Edukte}}} \quad (5.1)$$

γ_{Produkte} bzw. γ_{Edukte} sind die Aktivitätskoeffizienten der an der Reaktion beteiligten Produkte und Edukte und K_γ ist der Korrekturbeitrag der Gleichgewichtskonstanten aus den Aktivitätskoeffizienten.

Für die Gleichgewichtskonstante der Bildung von Halbacetal 1 gilt:

$$K_I = \frac{x_{HA1}}{x_{Ald} \cdot x_{Alk}} \cdot \frac{\gamma_{HA1}}{\gamma_{Ald} \cdot \gamma_{Alk}} \quad (5.2)$$

Für die Bildung von Halbacetal 2 ergibt sich für die Gleichgewichtskonstante:

$$K_{II} = \frac{x_{HA2} \cdot x_{Alk}}{x_{HA1} \cdot x_{HA1}} \cdot \frac{\gamma_{HA2} \cdot \gamma_{Alk}}{\gamma_{HA1} \cdot \gamma_{HA1}} \quad (5.3)$$

und für die Bildung von Halbacetal 3:

$$K_{III} = \frac{x_{HA3} \cdot x_{Alk}}{x_{HA1} \cdot x_{HA2}} \cdot \frac{\gamma_{HA3} \cdot \gamma_{Alk}}{\gamma_{HA1} \cdot \gamma_{HA2}}. \quad (5.4)$$

Die benötigten Aktivitätskoeffizienten wurden mit der Gruppenbeitragsmethode „modified UNIFAC Dortmund“ ([FGR77], [WG87], [GLS93], [GLJ+98]) berechnet. Die Gruppeneinteilung der Stoffe, die Volumen- und Oberflächenparameter der Gruppen sowie die verwendeten UNIFAC-Wechselwirkungsparameter sind im Anhang (Kapitel 8.1.5) zusammengefasst.

Die Tabellen 5.1 bzw. 5.2 enthalten für die Systeme aus Acetaldehyd und Methanol sowie Decanal und Methanol die Zahlenwerte der Pseudogleichgewichtskonstanten

Tabelle 5.1: Gleichgewichtskonstanten K_x und K_γ für die Reaktion von Acetaldehyd und Methanol, Bezugsgröße Aldehyd

| $n_A^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|-------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 40,8 | 59,2 | 12,162 | 2,604 | 31,68 | 0,017 | 0,908 | 0,015 | 0,276 | 0,918 | 0,25 |
| 49,8 | 50,2 | 10,841 | 2,126 | 23,05 | 0,017 | 0,890 | 0,015 | 0,168 | 0,896 | 0,15 |
| 60,1 | 39,9 | 6,938 | 1,473 | 10,22 | 0,022 | 0,924 | 0,020 | 0,179 | 0,933 | 0,17 |

Tabelle 5.2: Gleichgewichtskonstanten K_x und K_γ für die Reaktion von Decanal und Methanol, Bezugsgröße Aldehyd

| $n_D^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|-------|------------|-----------------|----------|
| 19,6 | 80,0 | 9,31 | 2,068 | 19,25 | - | - | - |
| 39,1 | 60,1 | 8,25 | 1,681 | 13,87 | - | - | - |
| 49,1 | 49,9 | 8,59 | 1,353 | 11,63 | 0,009 | 1,342 | 0,012 |
| 58,8 | 40,0 | 6,84 | 0,977 | 6,68 | 0,011 | 1,371 | 0,015 |
| 78,6 | 19,8 | 7,60 | 0,576 | 4,38 | 0,012 | 1,583 | 0,019 |

K_x , des Korrekturbeitrags K_γ und der Gleichgewichtskonstanten K für alle behandelten Reaktionen. Die Analyse der Werte für den kleinsten (Acetaldehyd) und größten aliphatischen Aldehyd (Decanal) zeigt stellvertretend für alle untersuchten Systeme, dass die Berücksichtigung von K_γ nicht dazu führt, dass die verschiedenen Zahlenwerte der konzentrationsabhängigen Gleichgewichtskonstanten K_x zu einem Zahlenwert K konvergieren. Vielmehr bewirkt das Einführen von K_γ noch größere Unterschiede zwischen den Zahlenwerten der Gleichgewichtskonstanten. Deshalb wird darauf verzichtet, die konzentrationsabhängigen Gleichgewichtskonstanten K_x umzurechnen, bevor sie mit den quantenchemisch bestimmten Werten der Gleichgewichtskonstanten verglichen werden. Beim Vergleich werden die Gleichgewichtskonstanten K_x der annähernd äquimolaren Einsatzmischungen aus Aldehyd und Alkohol verwendet, da diese in der NMR-Auswertung mit beiden Bezugsgrößen die ähnlichsten Werte liefern und in der Regel die größte Genauigkeit besitzen (vgl. Kapitel 3.3).

5.2 Umrechnung der Rechenergebnisse auf die flüssige Phase

Die untersuchten Mischungen aus Aldehyden, Alkoholen und Halbacetalen liegen bei den ausgewählten Reaktionsbedingungen flüssig vor. Deshalb wird in den NMR-Experimenten eine Gleichgewichtskonstante in der flüssigen Phase bestimmt. Da die quantenchemischen Rechnungen für die Gasphase erfolgten, müssen die Ergebnisse auf die flüssige Phase umgerechnet werden, um sie mit den experimentellen Ergebnissen vergleichen zu können.

Für das chemische Gleichgewicht einer Reaktion zwischen idealen Gasen bei Standarddruck gilt:

$$K_{Gas}(T) = K_y(T) = K_p(T) = \prod_i \left(\frac{p_i}{p^\Theta} \right)^{\nu_i} \quad (5.5)$$

$K_{Gas}(T)$ ist allgemein die Gleichgewichtskonstante einer Reaktion in der Gasphase. $K_y(T)$ ist die Gleichgewichtskonstante einer Reaktion in der Gasphase, berechnet aus den Molanteilen der beteiligten Komponenten. $K_p(T)$ ist die Gleichgewichtskonstante einer Reaktion in der Gasphase, berechnet aus den Partialdrücken der beteiligten Komponenten.

Das Raoult'sche Gesetz ergibt für den Partialdruck p_i in der Gasphase unter Vernachlässigung der Poynting-Korrektur und des realen Gasverhaltens der reinen Komponente auf der Taulinie:

$$p_i = p_i^S \cdot x_i \cdot \gamma_i \quad (5.6)$$

In der Gleichung 5.6 sind p_i^S der Dampfdruck, x_i der Molanteil in der flüssigen Phase und γ_i der Aktivitätskoeffizient der Komponente i. Damit ergibt sich für die Gleichgewichtskonstante:

$$K_{Gas} = \prod_i \left(\frac{p_i^S \cdot x_i \cdot \gamma_i}{p^\Theta} \right)^{\nu_i} \quad (5.7)$$

Für die in der vorliegenden Arbeit untersuchten Gleichgewichtskonstanten der Halbacetalbildung gilt:

$$K_{Gas,HA1}(T) = \frac{p_{HA1}^S \cdot p^\Theta}{p_{Ald}^S \cdot p_{Alk}^S} \cdot \underbrace{\frac{x_{HA1}}{x_{Ald} \cdot x_{Alk}}}_{K_{x,HA1}} \cdot \underbrace{\frac{\gamma_{HA1}}{\gamma_{Ald} \cdot \gamma_{Alk}}}_{K_{\gamma,HA1}} = \frac{p_{HA1}^S \cdot p^\Theta}{p_{Ald}^S \cdot p_{Alk}^S} \cdot K_{liq,HA1}(T) \quad (5.8)$$

$$K_{liq,HA1}(T) = K_{Gas,HA1}(T) \cdot \frac{p_{Ald}^S \cdot p_{Alk}^S}{p_{HA1}^S \cdot p^\Theta} \quad (5.9)$$

$K_{Gas,HA1}$ bzw. $K_{liq,HA1}$ sind die temperaturabhängigen Gleichgewichtskonstanten bei der Halbacetalbildung in der Gasphase bzw. in der flüssigen Phase und p_{HA1}^S , p_{Ald}^S und p_{Alk}^S die Dampfdrücke der Halbacetale 1, Aldehyde und Alkohole, die an der untersuchten Reaktion beteiligt sind.

Um die in der Gasphase berechneten Gleichgewichtskonstanten auf die flüssige Phase umzurechnen, werden die Dampfdrücke von allen an der Reaktion beteiligten Stoffen benötigt. In der vorliegenden Arbeit werden die Dampfdrücke der kleinen aliphatischen Aldehyde und Alkohole mit Hilfe der Antoine-Gleichung beschrieben.

Tabelle 5.3: Antoine-Parameter der reinen Komponenten bei 298 K

| | A | B | C | p^S [bar] |
|-------------|---------|---------|--------|-------------|
| Acetaldehyd | 16,2481 | 2465,15 | -37,15 | 1,201 |
| Propanal | 16,2315 | 2659,02 | -44,15 | 0,424 |
| Butanal | 16,1668 | 2839,09 | -50,15 | 0,149 |
| Methanol | 18,5875 | 3626,55 | -34,29 | 0,169 |
| Ethanol | 18,9119 | 3803,98 | -41,68 | 0,079 |
| 1-Propanol | 17,5439 | 3166,38 | -80,15 | 0,027 |

Tabelle 5.4: Dampfdrücke der verschiedenen Methoden bei 298 K

| | $p_{M./G.}^S$ [bar] | $p_{C./G.}^S$ [bar] | $p_{J./R.}^S$ [bar] | p_W^S [bar] | $p_{Antoine}^S$ [bar] |
|-------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------|-----------------------|
| Acetaldehyd | 2,414 | 1,591 | 1,208 | 2,951 | 1,201 |
| Butanal | 0,139 | 0,090 | 0,194 | 0,120 | 0,149 |
| 1-Propanol | 0,099 | 0,051 | 0,053 | 0,082 | 0,027 |

$$p^S = \exp \left(A - \frac{B}{C + (T/K)} \right) \quad (5.10)$$

Die benötigten Parameter werden aus der Literatur [RPP77] übernommen. Sie sind in der Tabelle 5.3 zusammengefasst. Da für die größeren Aldehyde Heptanal, Decanal, 3-Phenylpropanal und 2-Chlorbenzaldehyd sowie für alle untersuchten Halbacetale keine Antoine-Parameter zur Verfügung stehen, wurden für diese Stoffe die benötigten Dampfdrücke mit dem Programm ProPred 3.0 Beta [MG01b] abgeschätzt. In ProPred 3.0 Beta sind vier Methoden zur Dampfdruckberechnung implementiert: die Joback/Reid-Methode [JR87], die Constantinou/Gani-Methode [CG94], [YF83], die Marrero/Gani-Methode [MG01a] und die Wilson-Methode [WJ96].

Die Tabelle 5.4 vergleicht für drei ausgewählte typische Stoffe die Dampfdrücke, die mit den vier Methoden aus ProPred 3.0 Beta berechnet wurden mit experimentellen Angaben (d. h. mit Dampfdrücken, die mit der Antoine-Gleichung berechnet wurden.) $p_{M./G.}^S$ bzw. $p_{C./G.}^S$ sind die mit den Methoden von Marrero/Gani bzw. von Constantinou/Gani berechneten Dampfdrücke. Der Dampfdruck $p_{J./R.}^S$ wurde mit der Joback/Reid-Methode berechnet, der Dampfdruck p_W^S mit der Methode von Wilson. $p_{Antoine}^S$ ist der aus der Antoine-Gleichung berechnete Dampfdruck.

Der Ansatz von Joback/Reid zeigt für alle drei Stoffe eine gute Übereinstimmung mit den experimentell bestimmten (d.h. mit den aus der Antoine-Gleichung berechneten) Dampfdrücken. Insbesondere für Acetaldehyd wird eine sehr gute Übereinstimmung erreicht. Mit der Methode von Constantinou/Gani werden ähnliche Abweichungen wie mit der Methode von Joback/Reid erzielt, nur für Acetaldehyd ist die Abweichung etwas größer. Die beiden verbleibenden Methoden (Marrero/Gani bzw. Wilson) liefern ähnliche Werte für die Dampfdrücke. Die Werte für

Tabelle 5.5: Gleichgewichtskonstanten in der Gasphase und in der flüssigen Phase für die Reaktion von Acetaldehyd mit Methanol zu 1-Methoxyethanol

| | Gasphase | Flüssige Phase | | | |
|-------------------------------|-----------|----------------|-------------|-------------|--------|
| | K_{Gas} | $K_{M./G.}$ | $K_{C./G.}$ | $K_{J./R.}$ | $K_W.$ |
| B3LYP/6-31G(d) - scale - VI | 0,089 | 0,416 | 0,568 | 1,149 | 0,525 |
| B3LYP/6-31G(d) - scale - VII | 0,072 | 0,337 | 0,460 | 0,930 | 0,425 |
| B3LYP/6-31G(d) - scale - VIII | 0,084 | 0,394 | 0,537 | 1,088 | 0,497 |

Tabelle 5.6: Gleichgewichtskonstanten in der Gasphase und in der flüssigen Phase für die Reaktion von Acetaldehyd mit Methanol zu 1-Methoxyethanol

| | Gasphase | Flüssige Phase | | | |
|----------------------------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|
| | K_{Gas} | $K_{M./G.}$ | $K_{C./G.}$ | $K_{J./R.}$ | $K_W.$ |
| B3LYP/cc-pVTZ - scale VI | $1,90 \cdot 10^{-4}$ | $8,94 \cdot 10^{-4}$ | $1,22 \cdot 10^{-3}$ | $2,47 \cdot 10^{-3}$ | $1,13 \cdot 10^{-3}$ |
| B3LYP/cc-pVTZ - scale VII | $1,45 \cdot 10^{-4}$ | $6,79 \cdot 10^{-4}$ | $9,25 \cdot 10^{-4}$ | $1,87 \cdot 10^{-3}$ | $8,56 \cdot 10^{-4}$ |
| B3LYP/cc-pVTZ - scale VIII | $1,76 \cdot 10^{-4}$ | $8,24 \cdot 10^{-4}$ | $1,12 \cdot 10^{-3}$ | $2,28 \cdot 10^{-3}$ | $1,04 \cdot 10^{-3}$ |

Butanal stimmen gut mit dem Antoine-Dampfdruck überein. Für Acetaldehyd und 1-Propanol werden größere Abweichungen (Faktor etwa 2 - 3,5) vom experimentell bestimmten Dampfdruck beobachtet.

In den Tabellen 5.5 und 5.6 sind beispielhaft für die Reaktion von Acetaldehyd mit Methanol zu 1-Methoxyethanol für beide Basissätze die Gleichgewichtskonstanten in der Gasphase und die auf die flüssige Phase umgerechneten Gleichgewichtskonstanten bei der Temperatur 298,15 K zusammengefasst.

K_{Gas} ist die mit Gaussian 03 berechnete Gleichgewichtskonstante in der Gasphase. $K_{M./G.}$ bzw. $K_{C./G.}$ sind die Gleichgewichtskonstanten der flüssigen Phase bei denen alle Dampfdrücke, die nicht mit Hilfe der Antoine-Gleichung bestimmt werden konnten, mit der Marrero/Gani-Methode bzw. der Constantinou/Gani-Methode berechnet wurden. Für die Gleichgewichtskonstante der flüssigen Phase $K_{J./R.}$ werden die Dampfdrücke der Stoffe für die keine Antoine-Parameter zur Verfügung stehen mit dem Ansatz von Joback/Reid berechnet. Bei der Berechnung von $K_W.$ werden die fehlenden Dampfdrücke mit dem Modell von Wilson bestimmt.

Die Gleichgewichtskonstanten in der flüssigen Phase sind alle etwa fünf bis zehn mal größer als die Gleichgewichtskonstanten in der Gasphase. Die kleinsten Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten werden erreicht, wenn der Dampfdruck des Halbacetals mit der Methode nach Marrero/Gani berechnet wird, die größten Werte erhält man mit der Joback/Reid-Methode.

5.3 Vergleich und Diskussion

Im folgenden Kapitel wird für eine charakteristische Auswahl an Systemen ein Vergleich zwischen den experimentell bestimmten Werten der Gleichgewichtskonstanten und den mit B3LYP 6-31G(d) scale bzw. B3LYP cc-pVTZ scale berech-

neten Werten durchgeführt. Die Ergebnisse der anderen Systeme sind im Anhang (Kap. 8.2.6) zusammengestellt.

Bei der Umrechnung von der Gasphase auf die flüssige Phase wurden alle Dampfdrücke der Halbacetale sowie die Dampfdrücke von Heptanal, Decanal, 3-Phenylpropanal und 2-Chlorbenzaldehyd mit ProPred 3.0 Beta berechnet. Für 2-Chlorbenzaldehyd und 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol kann mit ProPred 3.0 Beta die Methode von Constantinou/Gani nicht verwendet werden. Deshalb konnten für die Reaktion von 2-Chlorbenzaldehyd mit Methanol nur drei berechnete Gleichgewichtskonstanten in der flüssigen Phase bestimmt werden. Für die restlichen Aldehyde und die ausgewählten Alkohole wurden die Dampfdrücke mit der Antoine-Gleichung bestimmt.

5.3.1 B3LYP 6-31G(d) scale

Die Tabelle 5.7 zeigt für alle drei ausgewählten Varianten (vgl. Kap. 4.2.3.1) die Zahlenwerte der experimentell bestimmten Gleichgewichtskonstanten und die mit B3LYP 6-31G(d) scale berechneten und auf die flüssige Phase umgerechneten Gleichgewichtskonstanten für die ausgewählten Aldehyde mit Methanol.

Tabelle 5.7: Berechnete Gleichgewichtskonstanten (B3LYP 6-31G(d) scale) und experimentell bestimmte Gleichgewichtskonstanten $K_{x,50/50}$ der äquimolaren Einsatzmischungen der ausgewählten Aldehyde mit Methanol

| V | Mischung | $K_{berechnet}$ | | | | K_{exp} |
|-----|------------------------|----------------------|-------------|----------------------|----------------------|---------------|
| | | $K_{M./G.}$ | $K_{C./G.}$ | $K_{J./R.}$ | $K_W.$ | $K_{x,50/50}$ |
| I | Acetaldehyd + M | 0,416 | 0,568 | 1,149 | 0,525 | 11,24 |
| I | Butanal + M | 1,037 | 1,405 | 2,249 | 0,793 | 7,18 |
| I | Decanal + M | 0,371 | 1,095 | 11,065 | 0,354 | 6,37 |
| I | 3-Phenylpropanal + M | 0,532 | 1,469 | 16,200 | 0,398 | 8,68 |
| I | 2-Chlorbenzaldehyd + M | $1,50 \cdot 10^{-3}$ | - | $6,83 \cdot 10^{-3}$ | $4,30 \cdot 10^{-4}$ | 0,597 |
| II | Acetaldehyd + M | 0,337 | 0,460 | 0,930 | 0,425 | 11,24 |
| II | Butanal + M | 0,312 | 0,423 | 0,678 | 0,239 | 7,18 |
| II | Decanal + M | 0,072 | 0,213 | 2,152 | 0,069 | 6,37 |
| II | 3-Phenylpropanal + M | 0,234 | 0,646 | 7,126 | 0,175 | 8,68 |
| II | 2-Chlorbenzaldehyd + M | $2,59 \cdot 10^{-4}$ | - | $1,18 \cdot 10^{-3}$ | $7,40 \cdot 10^{-5}$ | 0,597 |
| III | Acetaldehyd + M | 0,394 | 0,537 | 1,088 | 0,497 | 11,24 |
| III | Butanal + M | 1,443 | 1,955 | 3,130 | 1,103 | 7,18 |
| III | Decanal + M | 0,893 | 2,638 | 26,657 | 0,854 | 6,37 |
| III | 3-Phenylpropanal + M | 1,405 | 3,881 | 42,782 | 1,050 | 8,68 |
| III | 2-Chlorbenzaldehyd + M | $1,08 \cdot 10^{-3}$ | - | $4,91 \cdot 10^{-3}$ | $3,09 \cdot 10^{-4}$ | 0,597 |

Alle berechneten Gleichgewichtskonstanten sind deutlich kleiner (um bis zu drei Größenordnungen) als die in den NMR-Experimenten bestimmten Zahlenwerte. Die beste Übereinstimmung mit den experimentellen Werten wird für alle untersuchten Systeme, unabhängig von der Variante, mit den Werten erreicht, die

über die Dampfdrücke von Joback/Reid bestimmt werden. Der berechnete Zahlenwert der Gleichgewichtskonstanten der Reaktion von Acetaldehyd mit Methanol zu 1-Methoxyethanol ist in allen drei Varianten etwa eine Größenordnung kleiner als der experimentell bestimmte Wert. Für die Systeme mit Decanal und Methanol sowie 3-Phenylpropanal und Methanol liefert die Auswertung mit Variante II eine sehr gute Übereinstimmung zwischen experimentellem und berechnetem Wert der Gleichgewichtskonstanten (Faktor ≈ 3 bzw. Faktor $\approx 1,2$). In den Auswertungen für Variante I und Variante III sind, im Gegensatz zur Auswertung mit Variante II, die berechneten Werte für 1-Methoxy-1-Decanol bzw. 1-Methoxy-3-Phenylpropanol größer als die experimentellen Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten (Faktor ≈ 2 bzw. Faktor ≈ 5). Die größten Abweichungen werden mit der Methode von Joback/Reid für die Gleichgewichtskonstanten bei der Bildung von 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol erhalten: Die berechneten Werte sind für die drei Varianten etwa 100 bis 500 mal kleiner als der experimentell bestimmte Wert. Die Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten, die über die Dampfdrücke der verbleibenden drei Methoden berechnet wurden, unterscheiden sich nicht wesentlich. Die Abweichungen sind größer als mit der Methode von Joback/Reid. Für die Reaktion von Acetaldehyd mit Methanol zu 1-Methoxyethanol wird für alle drei Varianten die größte Abweichung vom experimentellen Wert mit der Methode von Marrero/Gani erreicht. Der Faktor beträgt ungefähr 30. Für alle anderen ausgewählten Systeme werden die größten Abweichungen mit der Dampfdruckberechnung nach Wilson erreicht. Für die Reaktion von 2-Chlorbenzaldehyd mit Methanol liegen die Abweichungen, unabhängig von der Variante, im Bereich von drei Größenordnungen.

Für die Systeme mit den kleinen Aldehydmolekülen Acetaldehyd und Butanal sowie für den aromatischen Aldehyd 2-Chlorbenzaldehyd sind die Abweichungen zwischen den verschiedenen Methoden der Dampfdruckberechnung deutlich kleiner als die Abweichung zu den experimentellen Werten. Im Gegensatz dazu sind für die Reaktionen von Decanal mit Methanol und 3-Phenylpropanal mit Methanol die Gleichgewichtskonstanten, die über die Dampfdrücke von Joback/Reid berechnet wurden, deutlich näher an den experimentell bestimmten Werten der Gleichgewichtskonstanten als an den mit weiteren Methoden berechneten Werten. Bei allen hier gezeigten Systemen bewirkt die Umrechnung der in der Gasphase bestimmten Gleichgewichtskonstanten K_{Gas} auf die flüssige Phase keine Änderung in den Tendenzen der Gleichgewichtskonstanten.

In der Auswertung mit Variante I ist die Reaktivität von Acetaldehyd mit Methanol kleiner als die von Butanal mit Methanol. Schätzt man die Dampfdrücke mit der Joback/Reid-Methode ab, dann erhält man für die Reaktion von Decanal mit Methanol zu 1-Methoxy-1-Decanol um eine Größenordnung größere Zahlenwerte für die Gleichgewichtskonstante als für die Reaktion von Acetaldehyd und Methanol zu 1-Methoxyethanol.

Die mit Variante II berechneten Werte besitzen auch nach der Umrechnung auf die flüssige Phase mit den drei Dampfdruckmethoden von Marrero/Gani, Constantinou/Gani sowie Wilson die im Experiment beobachtete Tendenz: Mit steigender Alkylkettenlänge des Aldehyds nimmt die Reaktivität ab. Bei den Werten der Gleichgewichtskonstanten, die über die Dampfdrücke von Joback/Reid auf die

flüssige Phase umgerechnet wurden, besitzt der größte aliphatische Aldehyd Decanal eine größere Reaktivität als Acetaldehyd bzw. Butanal mit Methanol.

Die Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten, die mit Variante III berechnet wurden, sind für die Reaktion von Acetaldehyd mit Methanol zu 1-Methoxyethanol kleiner als die entsprechenden Zahlenwerte für die Reaktionen von Butanal, Decanal bzw. 3-Phenylpropanal mit Methanol. Mit der Methode von Joback/Reid ist der Zahlenwert der Gleichgewichtskonstanten für die Reaktion von Decanal mit Methanol etwa 26 mal größer als der Zahlenwert für die Reaktion von Acetaldehyd mit Methanol.

Die Tabelle 5.8 zeigt für alle drei Varianten (vgl. Kap. 4.2.3.1) die experimentell bestimmten und die berechneten Werte der Gleichgewichtskonstanten für die Mischungen aus Acetaldehyd mit allen untersuchten Alkoholen.

Tabelle 5.8: Berechnete Gleichgewichtskonstanten (B3LYP 6-31G(d)scale) und experimentell bestimmte Gleichgewichtskonstanten $K_{x,50/50}$ der äquimolaren Einsatzmischungen mit Acetaldehyd für alle drei Varianten

| V | Mischung | $K_{berechnet}$ | | | | K_{exp} |
|-----|--------------------------|-----------------|-------------|-------------|--------|---------------|
| | | $K_{M./G.}$ | $K_{C./G.}$ | $K_{J./R.}$ | $K_W.$ | $K_{x,50/50}$ |
| I | Acetaldehyd + Methanol | 0,416 | 0,568 | 1,149 | 0,525 | 11,24 |
| I | Acetaldehyd + Ethanol | 0,203 | 0,323 | 0,932 | 0,270 | 4,70 |
| I | Acetaldehyd + 1-Propanol | 0,232 | 0,398 | 1,021 | 0,204 | 4,56 |
| II | Acetaldehyd + Methanol | 0,337 | 0,460 | 0,930 | 0,425 | 11,24 |
| II | Acetaldehyd + Ethanol | 0,121 | 0,193 | 0,557 | 0,162 | 4,70 |
| II | Acetaldehyd + 1-Propanol | 0,165 | 0,284 | 0,729 | 0,146 | 4,56 |
| III | Acetaldehyd + Methanol | 0,394 | 0,537 | 1,088 | 0,497 | 11,24 |
| III | Acetaldehyd + Ethanol | 0,172 | 0,274 | 0,790 | 0,229 | 4,70 |
| III | Acetaldehyd + 1-Propanol | 0,231 | 0,396 | 1,017 | 0,203 | 4,56 |

Die Analyse der Auswertung der drei Varianten zeigt, dass die Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten für die Reaktionen von Acetaldehyd mit Ethanol bzw. mit 1-Propanol sowohl für die experimentellen als auch die berechneten Werte nahe beieinander liegen. Beim Wechsel des Alkohols von Methanol zu Ethanol bzw. 1-Propanol sind die Abweichungen vom experimentellen Wert umso kleiner, je größer das Alkoholmolekül wird. Die geringsten Abweichungen besitzen die Gleichgewichtskonstanten, die mit der Methode von Joback/Reid bestimmt wurden. Für die Bildung von 1-Propoxyethanol ist bei der Verwendung von Variante I beispielsweise der experimentelle Wert etwa 4,5 mal größer als der berechnete Wert. Die Umrechnung der berechneten Gleichgewichtskonstanten K_{Gas} auf die flüssige Phase bewirkt bei allen drei Varianten - bei Einsatz der Methoden von Marrero/Gani, Constantinou/Gani und Joback/Reid - einen etwas größeren Wert der Gleichgewichtskonstanten für die Bildung von 1-Propoxyethanol als von 1-Ethoxyethanol. Nur mit der Methode von Wilson ist die Reaktivität von Acetaldehyd mit 1-Propanol, wie im Experiment, am kleinsten.

Nur die Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten, die mit Variante II berechnet wurden, sind in Kombination mit den Dampfdruckberechnungen nach Marro/Gani, Constantinou/Gani und Wilson in der Lage, die Tendenzen der experimentellen Gleichgewichtskonstanten $K_{x,50/50}$ (bei Zunahme der Alkylkettenlänge des Aldehyds) qualitativ korrekt zu beschreiben. Die Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten mit der Dampfdruckberechnung nach Joback/Reid liegen zwar deutlich dichter an den experimentellen Werten als die Werte der anderen Methoden, können aber nicht die im Experiment gefundene Reihenfolge der Zahlenwerte wiedergeben.

Der Einfluss der Alkylkettenlänge des Alkohols auf den Wert der Gleichgewichtskonstanten liefert für alle drei Varianten dieselbe Größenordnung und dieselben Tendenzen. Nur mit der Methode von Wilson nimmt für die Systeme mit Acetaldehyd, wie im Experiment, der Zahlenwert der Gleichgewichtskonstanten mit zunehmender Alkylkettenlänge des Alkohols ab.

Die Auswertung mit Variante II in Kombination mit der Dampfdruckberechnung nach Wilson ist am besten in der Lage, die Tendenzen der experimentell gefundenen Zahlenwerte für die Gleichgewichtskonstanten sowohl bei der Änderung der Kettenlänge des Aldehyds als auch des Alkohols abzubilden. Die besten Übereinstimmungen der Zahlenwerte zwischen Experiment und Berechnungen werden aber mit den Varianten I und II nach der Umrechnung auf die flüssige Phase mit der Dampfdruckmethode von Joback/Reid erreicht.

Die Zahlenwerte, die mit der Kombination aus B3LYP und 6-31G(d) scale berechnet werden, stimmen im Einzelfall gut mit den experimentellen Werten überein. Da der gewählte Basissatz 6-31G(d) scale relativ klein ist, ist davon auszugehen, dass die z. T. guten Ergebnisse eine Folge davon sind, dass sich mehrere Vernachlässigungen kompensieren.

5.3.2 B3LYP cc-pVTZ scale

Die mit B3LYP cc-pVTZ scale berechneten Gleichgewichtskonstanten, umgerechnet auf die flüssige Phase, sind für ausgewählte Aldehyde mit Methanol in der Tabelle 5.9 für alle drei Varianten zusammengefasst.

Für den relativ großen Basissatz cc-pVTZ scale konnte aus Zeitgründen für einige (größere) Moleküle nur das Konformer mit der geringsten Energie berechnet werden. Deshalb ist es nur für die Auswertung mit Variante I (K_{Gas} berechnet aus den Konformeren mit der geringsten Energie) möglich, die gleichen Systeme wie mit dem kleineren Basissatz (6-31G(d) scale) mit den experimentellen Ergebnissen zu vergleichen.

Alle berechneten Gleichgewichtskonstanten sind sehr viel kleiner (drei bis sechs Größenordnungen) als die experimentell bestimmten Werte.

Die größten Übereinstimmungen zwischen den experimentellen und berechneten Werten der Gleichgewichtskonstanten werden für alle drei Varianten erreicht, wenn die Umrechnung auf die flüssige Phase mit Hilfe der Dampfdrücke nach Joback/Reid erfolgt: Für die Reaktionen von Acetaldehyd mit Methanol zu 1-Methoxyethanol und Butanal mit Methanol zu 1-Methoxy-1-Butanol sind in allen Varianten die experimentellen Zahlenwerte um drei Größenordnungen größer als die berechne-

Tabelle 5.9: Berechnete Gleichgewichtskonstanten (B3LYP cc-pVTZ scale) und experimentell bestimmte Gleichgewichtskonstanten $K_{x,50/50}$ der äquimolaren Einsatzmischungen der ausgewählten Aldehyde mit Methanol

| V | Mischung | $K_{berechnet}$ | | | | $K_{exp.}$ |
|-----|------------------------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|---------------|
| | | $K_{M./G.}$ | $K_{C./G.}$ | $K_{J./R.}$ | $K_W.$ | $K_{x,50/50}$ |
| I | Acetaldehyd + M | $8,94 \cdot 10^{-4}$ | $1,22 \cdot 10^{-3}$ | $2,47 \cdot 10^{-3}$ | $1,13 \cdot 10^{-3}$ | 11,24 |
| I | Butanal + M | $8,64 \cdot 10^{-4}$ | $1,17 \cdot 10^{-3}$ | $1,87 \cdot 10^{-3}$ | $6,61 \cdot 10^{-4}$ | 7,18 |
| I | Decanal + M | $3,06 \cdot 10^{-4}$ | $9,02 \cdot 10^{-4}$ | $9,12 \cdot 10^{-3}$ | $2,92 \cdot 10^{-4}$ | 6,37 |
| I | 3-Phenylpropanal + M | $4,50 \cdot 10^{-4}$ | $1,24 \cdot 10^{-3}$ | $1,37 \cdot 10^{-2}$ | $3,36 \cdot 10^{-4}$ | 8,68 |
| I | 2-Chlorbenzaldehyd + M | $2,05 \cdot 10^{-6}$ | - | $9,30 \cdot 10^{-6}$ | $5,85 \cdot 10^{-7}$ | 0,597 |
| II | Acetaldehyd + M | $6,79 \cdot 10^{-4}$ | $9,25 \cdot 10^{-4}$ | $1,87 \cdot 10^{-3}$ | $8,56 \cdot 10^{-4}$ | 11,24 |
| II | Propanal + M | $4,14 \cdot 10^{-4}$ | $5,54 \cdot 10^{-4}$ | $9,24 \cdot 10^{-4}$ | $5,20 \cdot 10^{-4}$ | 7,18 |
| II | Butanal + M | $7,45 \cdot 10^{-4}$ | $1,01 \cdot 10^{-3}$ | $1,62 \cdot 10^{-3}$ | $5,70 \cdot 10^{-4}$ | 6,37 |
| II | 2-Chlorbenzaldehyd + M | $1,07 \cdot 10^{-6}$ | - | $4,88 \cdot 10^{-6}$ | $3,07 \cdot 10^{-7}$ | 0,597 |
| III | Acetaldehyd + M | $8,24 \cdot 10^{-4}$ | $1,12 \cdot 10^{-3}$ | $2,28 \cdot 10^{-3}$ | $1,04 \cdot 10^{-3}$ | 11,24 |
| III | Propanal + M | $6,31 \cdot 10^{-4}$ | $8,44 \cdot 10^{-4}$ | $1,41 \cdot 10^{-3}$ | $7,91 \cdot 10^{-4}$ | 7,18 |
| III | Butanal + M | $1,15 \cdot 10^{-3}$ | $1,56 \cdot 10^{-3}$ | $2,50 \cdot 10^{-3}$ | $8,80 \cdot 10^{-4}$ | 6,37 |
| III | 2-Chlorbenzaldehyd + M | $1,50 \cdot 10^{-6}$ | - | $6,83 \cdot 10^{-6}$ | $4,30 \cdot 10^{-7}$ | 0,597 |

ten. Für den Basissatz cc-pVTZ scale wurden nur für Variante I die Gleichgewichtskonstanten für die Mischungen aus Decanal und Methanol sowie 3-Phenylpropanal und Methanol berechnet. Die experimentellen Werte für diese Einsatzmischungen sind um zwei Größenordnungen größer als die berechneten Zahlenwerte. Die größten Abweichungen mit der Methode von Joback/Reid wurden für alle drei Varianten für die Reaktion von 2-Chlorbenzaldehyd mit Methanol erhalten: Die Unterschiede zwischen berechneten und experimentellen Zahlenwerten liegen für Variante I und Variante III im Bereich von vier, für Variante II sogar bei fünf Größenordnungen.

Die Gleichgewichtskonstanten, die mit den weiteren drei Methoden zur Dampfdruckberechnung ermittelt wurden, zeigen noch größere Abweichungen zu den experimentellen Werten. Für die Bildung von 1-Methoxyethanol erhält man mit der Methode von Marrero/Gani die größte Abweichung. Für alle drei Varianten sind die experimentellen Werte um vier Größenordnungen größer als die berechneten Zahlenwerte. Für alle weiteren Systeme wurden mit der Dampfdruckberechnung nach Wilson die größten Abweichungen beobachtet. Die Größenordnung der Unterschiede liegt für alle Systeme, mit Ausnahme der Systeme mit 2-Chlorbenzaldehyd, im Bereich von vier. Für die Bildung von 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol liegen die experimentell bestimmten Werte für alle Varianten sogar um sechs Größenordnungen über den Rechenergebnissen.

Die auf die flüssige Phase umgerechneten Gleichgewichtskonstanten unterscheiden sich je nach verwendeter Methode der Dampfdruckberechnung. Für die Reaktion von Acetaldehyd mit Methanol zu 1-Methoxyethanol ist der Wert, der mit Joback/Reid berechneten Gleichgewichtskonstanten etwa doppelt so groß wie der

kleinste Zahlenwert, der mit der Methode von Marrero/Gani berechnet wurde. Die Bildungsreaktion von 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol führt bei den ausgewählten Beispielen zu den größten Unterschieden: Die mit der Methode von Joback/Reid berechnete Gleichgewichtskonstante ist etwa 15 mal größer als die mit der Methode von Wilson bestimmte Gleichgewichtskonstante.

In der Auswertung mit Variante I bewirkt die Umrechnung der berechneten Gasphasenergebnisse über die Dampfdrücke auf die flüssige Phase bei zunehmender Länge der Aldehydkette keine Änderung der Tendenzen. Bei der Auswertung mit Variante II und Variante III ist in der Gasphase die Gleichgewichtskonstante K_{Gas} für die Bildung von 1-Methoxyethanol am größten. Nach der Umrechnung auf die flüssige Phase ist der Wert der Gleichgewichtskonstanten für die Reaktion von Butanal mit Methanol zu 1-Methoxy-1-Butanol am größten.

In der Tabelle 5.10 sind für die drei Varianten die Änderungen der Gleichgewichtskonstanten in der flüssigen Phase in Abhängigkeit von der Alkylkettenlänge des Alkohols mit Acetaldehyd dargestellt.

Tabelle 5.10: Berechnete Gleichgewichtskonstanten (B3LYP cc-pVTZ scale) und experimentell bestimmte Gleichgewichtskonstanten $K_{x,50/50}$ der äquimolaren Einsatzmischungen mit Acetaldehyd

| V | Mischung | $K_{berechnet}$ | | | | K_{exp} |
|-----|--------------------------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|---------------|
| | | $K_{M./G.}$ | $K_{C./G.}$ | $K_{J./R.}$ | $K_W.$ | $K_{x,50/50}$ |
| I | Acetaldehyd + Methanol | $8,94 \cdot 10^{-4}$ | $1,22 \cdot 10^{-3}$ | $2,47 \cdot 10^{-3}$ | $1,13 \cdot 10^{-3}$ | 11,24 |
| I | Acetaldehyd + Ethanol | $4,90 \cdot 10^{-4}$ | $7,82 \cdot 10^{-4}$ | $2,26 \cdot 10^{-3}$ | $6,54 \cdot 10^{-4}$ | 4,70 |
| I | Acetaldehyd + 1-Propanol | $5,71 \cdot 10^{-4}$ | $9,79 \cdot 10^{-4}$ | $2,52 \cdot 10^{-3}$ | $5,03 \cdot 10^{-4}$ | 4,56 |
| II | Acetaldehyd + Methanol | $6,79 \cdot 10^{-4}$ | $9,25 \cdot 10^{-4}$ | $1,87 \cdot 10^{-3}$ | $8,56 \cdot 10^{-4}$ | 11,24 |
| II | Acetaldehyd + Ethanol | $2,73 \cdot 10^{-4}$ | $4,35 \cdot 10^{-4}$ | $1,25 \cdot 10^{-3}$ | $3,64 \cdot 10^{-4}$ | 4,70 |
| II | Acetaldehyd + 1-Propanol | $4,62 \cdot 10^{-4}$ | $7,92 \cdot 10^{-4}$ | $2,04 \cdot 10^{-3}$ | $4,07 \cdot 10^{-4}$ | 4,56 |
| III | Acetaldehyd + Methanol | $8,24 \cdot 10^{-4}$ | $1,12 \cdot 10^{-3}$ | $2,28 \cdot 10^{-3}$ | $1,04 \cdot 10^{-3}$ | 11,24 |
| III | Acetaldehyd + Ethanol | $3,83 \cdot 10^{-4}$ | $6,10 \cdot 10^{-4}$ | $1,76 \cdot 10^{-3}$ | $5,10 \cdot 10^{-4}$ | 4,70 |
| III | Acetaldehyd + 1-Propanol | $5,59 \cdot 10^{-4}$ | $9,59 \cdot 10^{-4}$ | $2,46 \cdot 10^{-3}$ | $4,93 \cdot 10^{-4}$ | 4,56 |

Der Wechsel des Alkohols hat keinen signifikanten Einfluss auf die Abweichungen zu den experimentell bestimmten Gleichgewichtskonstanten. Für alle untersuchten Systeme sind die experimentellen Werte um drei bis vier Größenordnungen größer als die berechneten Werte. Für alle drei Varianten und alle vier Dampfdruckmethoden gilt, dass beim Wechsel des Alkohols von Methanol zu Ethanol die berechneten Werte der Gleichgewichtskonstanten in etwa derselben Größenordnung kleiner werden wie die experimentell bestimmten Werte.

Im Gegensatz dazu bewirkt ein Wechsel des Alkohols von Ethanol zu 1-Propanol in den meisten untersuchten Fällen einen größeren Zahlenwert der berechneten Gleichgewichtskonstanten. Mit der Methode von Joback/Reid werden für alle drei Varianten Gleichgewichtskonstanten berechnet, die größer sind als die Rechenwerte der Reaktion von Acetaldehyd mit Methanol zu 1-Methoxyethanol. Der Effekt,

dass das System mit 1-Propanol eine größere Reaktivität als das System mit Ethanol besitzt, tritt bei der Auswertung mit Variante I erst nach der Umrechnung auf die flüssige Phase auf. In den Auswertungen mit Variante II und Variante III sind schon die für die Gasphase berechneten Werte von K_{Gas} für die Reaktion von Acetaldehyd mit 1-Propanol etwas höher als bei der Reaktion von Acetaldehyd mit Ethanol (vgl. Kap. 4.3.2.2, Tabelle 4.8). Der Effekt wird aber durch die Umrechnung noch verstärkt.

Lediglich die Zahlenwerte, die in der Auswertung mit Variante I nach der Umrechnung mit den Methoden von Marrero/Gani, Constantinou/Gani oder Wilson bestimmt wurden, sind in der Lage, den Einfluss der Länge der Alkylkette des Aldehyds auf den Zahlenwert der Gleichgewichtskonstanten qualitativ korrekt zu beschreiben. Der Einfluss der Alkylkettenlänge des Alkohols auf den Wert der Gleichgewichtskonstanten kann in allen drei Varianten nur mit der Methode von Wilson qualitativ korrekt beschrieben werden.

Obwohl sich die Gleichgewichtskonstanten der flüssigen Phase, die über die verschiedenen Methoden der Dampfdruckberechnung bestimmt werden, unterscheiden, ist die Abweichung untereinander in allen hier untersuchten Fällen deutlich kleiner als die Abweichung zu den experimentell bestimmten Werten. Der Einfluss der Dampfdruckmethode auf die Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten spielt in Bezug auf die sehr großen Abweichungen zu den experimentellen Werten nur eine geringe Rolle.

Unabhängig von der Variante und gewählten Methode der Dampfdruckberechnung, ist die Methode B3LYP in Kombination mit dem Basissatz cc-pVTZ scale nicht in der Lage, die Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten der untersuchten Reaktionen quantitativ vorherzusagen.

5.3.3 Einfluss der Temperatur

Um die berechneten Werte der Gleichgewichtskonstanten mit den experimentellen Daten vergleichen zu können, werden die Dampfdrücke der Komponenten benötigt. Dazu wurden die Antoine-Gleichung bzw. die zuvor erwähnten Abschätzungsverfahren verwendet (vgl. Kapitel 5.2).

Da ProPred 3.0 Beta nur die Dampfdrücke im Temperaturbereich von 298 K bis 310 K liefert, werden für die damit behandelten Stoffe die molaren Verdampfungsenthalpien Δh_V aus ProPred 3.0 Beta bei 298 K verwendet, und die fehlenden Dampfdrücke bei $T = 273$ K über die Differentialgleichung der Phasengrenzkurve eines reinen Stoffes berechnet:

$$\frac{dp}{dT} = \frac{\Delta h_V}{T \cdot \Delta V_V} \quad (5.11)$$

Es wird die Näherung eingeführt, dass ΔV_V durch das Molvolumen des Gases v_{gas} ersetzt werden kann, da dieses viel größer als das der Flüssigkeit ist ($\Delta V_V = v_{gas}$).

Unter der Annahme eines idealen Gases gilt für v_{gas} :

$$v_{gas} = \frac{R \cdot T}{p} \quad (5.12)$$

Damit ergibt sich für Gleichung 5.11:

$$\frac{dp}{p} = \frac{\Delta h_V dT}{R \cdot T^2} \quad (5.13)$$

$$\ln \left(\frac{p_2}{p_1} \right) = \frac{\Delta h_V}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \quad (5.14)$$

Die Dampfdrücke der hier interessierenden Stoffe bei 273 K sind im Anhang (Kap. 8.2.5) zusammengestellt.

Die Tabelle 5.11 zeigt für ausgewählte aliphatische Aldehyde mit Methanol sowohl die auf die flüssige Phase umgerechneten als auch die experimentell bestimmten Gleichgewichtskonstanten $K_{x,50/50}$ bei 298 K und 273 K für alle drei Varianten (vgl. Kap. 4.2.3.1).

Die Analyse der Tabelle zeigt, dass die Auswertungen mit Variante I und Variante III zu denselben Resultaten führen: Für die Reaktion von Acetaldehyd mit Methanol zu 1-Methoxyethanol nimmt der Wert der berechneten Gleichgewichtskonstanten für alle Methoden der Dampfdruckberechnung beim Wechsel der Temperatur von 298 K auf 273 K etwa um den Faktor drei zu. Bei den experimentellen Ergebnissen führt der Wechsel der Reaktionsbedingungen auf 273 K zu einer Zunahme des Zahlenwerts um den Faktor 3,5. Für die Systeme aus Butanal mit Methanol bzw. Decanal mit Methanol sind die berechneten Werte der Gleichgewichtskonstanten in der flüssigen Phase mit den Methoden von Marrero/Gani, Constantinou/Gani und Joback/Reid für 273 K kaum größer als bei 298 K (Faktoren liegen zwischen 1 und 1,5). Nach Umrechnung mit der Methode von Wilson sind die Werte der Gleichgewichtskonstanten bei 273 K kleiner als bei 298 K (Faktor 0,8). Der Wert der experimentell bestimmten Gleichgewichtskonstanten $K_{x,50/50}$ der äquimolaren Einsatzmischungen ist für die Reaktion von Butanal mit Methanol zu 1-Methoxy-1-Butanol bei 273 K etwa vier mal größer als bei 298 K. Für die Mischung aus Decanal und Methanol war die Probe im Experiment gefroren, so dass kein Vergleich durchgeführt werden konnte.

In der Auswertung mit Variante II führt der Wechsel der Temperatur auf 273 K für alle hier untersuchten Systeme zu einer Zunahme der Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten um etwa den Faktor drei. Im Gegensatz zu den Auswertungen mit Variante I bzw. Variante III werden mit allen Methoden zur Dampfdruckberechnung bei der tieferen Temperatur - wie im Experiment - deutlich größere Werte der Gleichgewichtskonstanten erhalten.

Auch für die tiefere Temperatur (273 K) gilt mit allen Varianten, dass mit der Umrechnung über die Dampfdruckberechnung nach Joback/Reid die größten Zah-

Tabelle 5.11: Berechnete Gleichgewichtskonstanten (B3LYP 6-31G(d) scale) und experimentell bestimmte Gleichgewichtskonstanten $K_{x,50/50}$ der äquimolaren Einsatzmischungen ausgewählter Systeme, für drei Varianten

| V | | T[K] | $K_{berechnet}$ | | | | $K_{exp.}$ |
|-----|------------------------|------|-----------------|-------------|-------------|--------|---------------|
| | | | $K_{M./G.}$ | $K_{C./G.}$ | $K_{J./R.}$ | $K_W.$ | $K_{x,50/50}$ |
| I | Acetaldehyd + Methanol | 298 | 0,416 | 0,568 | 1,149 | 0,525 | 11,24 |
| | | 273 | 1,335 | 1,696 | 3,467 | 1,437 | 39,87 |
| I | Butanal + Methanol | 298 | 1,037 | 1,405 | 2,249 | 0,793 | 7,18 |
| | | 273 | 1,218 | 1,508 | 2,520 | 0,690 | 29,32 |
| I | Decanal + Methanol | 298 | 0,371 | 1,095 | 11,065 | 0,354 | 6,37 |
| | | 273 | 0,450 | 1,258 | 17,162 | 0,277 | gefroren |
| II | Acetaldehyd + Methanol | 298 | 0,337 | 0,460 | 0,930 | 0,425 | 11,24 |
| | | 273 | 1,082 | 1,375 | 2,810 | 1,165 | 39,87 |
| II | Butanal + Methanol | 298 | 0,312 | 0,423 | 0,678 | 0,239 | 7,18 |
| | | 273 | 1,075 | 1,330 | 2,223 | 0,608 | 29,32 |
| II | Decanal + Methanol | 298 | 0,072 | 0,213 | 2,152 | 0,069 | 6,37 |
| | | 273 | 0,253 | 0,708 | 9,653 | 0,156 | gefroren |
| III | Acetaldehyd + Methanol | 298 | 0,394 | 0,537 | 1,088 | 0,497 | 11,24 |
| | | 273 | 1,265 | 1,606 | 3,283 | 1,361 | 39,87 |
| III | Butanal + Methanol | 298 | 1,443 | 1,955 | 3,130 | 1,103 | 7,18 |
| | | 273 | 1,698 | 2,101 | 3,512 | 0,961 | 29,32 |
| III | Decanal + Methanol | 298 | 0,893 | 2,638 | 26,657 | 0,854 | 6,37 |
| | | 273 | 1,019 | 2,850 | 38,873 | 0,628 | gefroren |

lenwerte der Gleichgewichtskonstanten erreicht werden, die den experimentell bestimmten Zahlenwerten am nächsten kommen. Die Auswertungen mit Variante I und Variante III weisen für das System aus Butanal und Methanol eine deutlich größere Abweichung bei 273 K auf als bei 298 K. Die Auswertung mit Variante II führt für die gezeigten Systeme zu ähnlichen Abweichungen der berechneten von den experimentellen Werten wie bei 298 K.

In der Tabelle 5.12 sind die Werte der Gleichgewichtskonstanten für die Reaktionen von Acetaldehyd mit den ausgewählten Alkoholen zum Halbacetal 1 bei 273 K und 298 K für alle drei Varianten zusammengefasst. Für das System aus Acetaldehyd und Methanol werden zusätzlich noch die Ergebnisse bei 253 K gezeigt. Der verwendete Basissatz ist 6-31G(d) scale.

Für alle Varianten und für alle Dampfdruckmethoden sind die bei 273 K berechneten Werte der Gleichgewichtskonstanten um den Faktor zwei bis drei größer als die Werte bei 298 K. Dies entspricht sehr gut den experimentellen Beobachtungen. Für das System aus Acetaldehyd und Methanol bewirkt der Wechsel der Temperatur von 273 K auf 253 K, unabhängig von Variante und Dampfdruckmethode, eine Zunahme der Zahlenwerte um den Faktor 30.

Tabelle 5.12: Berechnete Gleichgewichtskonstanten (B3LYP 6-31G(d)scale) und experimentell bestimmte Gleichgewichtskonstanten $K_{x,50/50}$ der äquimolaren Einsatzmischungen mit Acetaldehyd, für drei Varianten (vgl. Kap. 4.2.3.1)

| V | | T[K] | $K_{berechnet}$ | | | | $K_{exp.}$ |
|-----|--------------------------|------|-----------------|-------------|-------------|--------|---------------|
| | | | $K_{M./G.}$ | $K_{C./G.}$ | $K_{J./R.}$ | $K_W.$ | $K_{x,50/50}$ |
| I | Acetaldehyd + Methanol | 298 | 0,416 | 0,568 | 1,149 | 0,525 | 11,24 |
| | | 273 | 1,335 | 1,696 | 3,467 | 1,437 | 39,87 |
| | | 253 | 40,27 | 47,82 | 98,67 | 37,34 | 103,1 |
| I | Acetaldehyd + Ethanol | 298 | 0,203 | 0,323 | 0,932 | 0,270 | 4,70 |
| | | 273 | 0,642 | 0,830 | 2,837 | 0,683 | 14,81 |
| I | Acetaldehyd + 1-Propanol | 298 | 0,232 | 0,398 | 1,021 | 0,204 | 4,56 |
| | | 273 | 0,667 | 0,918 | 2,852 | 0,408 | 14,33 |
| II | Acetaldehyd + Methanol | 298 | 0,337 | 0,460 | 0,930 | 0,425 | 11,24 |
| | | 273 | 1,082 | 1,375 | 2,810 | 1,165 | 39,87 |
| | | 253 | 32,64 | 38,76 | 79,97 | 30,26 | 103,1 |
| II | Acetaldehyd + Ethanol | 298 | 0,121 | 0,193 | 0,557 | 0,162 | 4,70 |
| | | 273 | 0,387 | 0,501 | 1,711 | 0,412 | 14,81 |
| II | Acetaldehyd + 1-Propanol | 298 | 0,165 | 0,284 | 0,729 | 0,146 | 4,56 |
| | | 273 | 0,480 | 0,660 | 2,051 | 0,293 | 14,33 |
| III | Acetaldehyd + Methanol | 298 | 0,394 | 0,537 | 1,088 | 0,497 | 11,24 |
| | | 273 | 1,265 | 1,606 | 3,283 | 1,361 | 39,87 |
| | | 253 | 38,14 | 45,28 | 93,44 | 35,37 | 103,1 |
| III | Acetaldehyd + Ethanol | 298 | 0,172 | 0,274 | 0,790 | 0,229 | 4,70 |
| | | 273 | 0,547 | 0,707 | 2,416 | 0,582 | 14,81 |
| III | Acetaldehyd + 1-Propanol | 298 | 0,231 | 0,396 | 1,017 | 0,203 | 4,56 |
| | | 273 | 0,666 | 0,917 | 2,850 | 0,407 | 14,33 |

Die Tendenzen der berechneten Gleichgewichtskonstanten sind mit allen drei Varianten sowohl bei 273 K als auch bei 298 K gleich: Nach der Umrechnung mit den Methoden von Marrero/Gani, Constantinou/Gani sowie Joback/Reid sind die Werte der Gleichgewichtskonstanten für die Bildung von 1-Propoxyethanol größer als die von 1-Ethoxyethanol. Nur mit der Dampfdruckberechnung von Wilson ist, wie im Experiment, die Reaktivität von Acetaldehyd mit Ethanol größer als mit 1-Propanol.

Die Abweichungen der berechneten Werte der Gleichgewichtskonstanten von den experimentell bestimmten Werten liegen für die untersuchten Reaktionen von Acetaldehyd mit den ausgewählten Alkoholen bei 273 K in derselben Größenordnung wie bei 298 K.

Für das System aus Acetaldehyd und Methanol werden die Zahlenwerte der berechneten Gleichgewichtskonstanten bei 253 K um den Faktor 30 größer. Der experimentelle Wert ändert sich beim Wechsel von 273 K auf 253 K nur um den Faktor 2,5. Dadurch werden die Abweichungen der berechneten Gleichgewichtskonstanten

von den experimentellen Werten, insbesondere mit der Dampfdruckmethode nach Joback/Reid, sehr klein (Faktor 1 - 2,5).

Die Tabelle 5.13 zeigt für Mischungen aus Acetaldehyd mit Alkoholen die mit den drei Varianten mit B3LYP cc-pVTZ scale berechneten, sowie die experimentell bestimmten Gleichgewichtskonstanten nach der Umrechnung auf die flüssige Phase mit den vier Methoden der Dampfdruckberechnung.

Tabelle 5.13: Berechnete Gleichgewichtskonstanten (B3LYP cc-pVTZ scale) und experimentell bestimmte Gleichgewichtskonstanten $K_{x,50/50}$ der äquimolaren Einatzmischungen mit Acetaldehyd, für drei Varianten (vgl. Kap. 4.2.3.1)

| V | | T[K] | $K_{berechnet}$ | | | | $K_{exp.}$ |
|-----|--------------------------|------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|---------------|
| | | | $K_{M./G.}$ | $K_{C./G.}$ | $K_{J./R.}$ | $K_W.$ | $K_{x,50/50}$ |
| I | Acetaldehyd + Methanol | 298 | $8,94 \cdot 10^{-4}$ | $1,22 \cdot 10^{-3}$ | $2,47 \cdot 10^{-3}$ | $1,13 \cdot 10^{-3}$ | 11,24 |
| | | 273 | $2,87 \cdot 10^{-3}$ | $3,64 \cdot 10^{-3}$ | $7,44 \cdot 10^{-3}$ | $3,09 \cdot 10^{-3}$ | 39,87 |
| | | 253 | $8,60 \cdot 10^{-2}$ | $1,02 \cdot 10^{-1}$ | $2,11 \cdot 10^{-1}$ | $7,97 \cdot 10^{-2}$ | 103,1 |
| I | Acetaldehyd + Ethanol | 298 | $4,90 \cdot 10^{-4}$ | $7,82 \cdot 10^{-4}$ | $2,26 \cdot 10^{-3}$ | $6,54 \cdot 10^{-4}$ | 4,70 |
| | | 273 | $1,56 \cdot 10^{-3}$ | $2,01 \cdot 10^{-3}$ | $6,87 \cdot 10^{-3}$ | $1,65 \cdot 10^{-3}$ | 14,81 |
| I | Acetaldehyd + 1-Propanol | 298 | $5,71 \cdot 10^{-4}$ | $9,79 \cdot 10^{-4}$ | $2,52 \cdot 10^{-3}$ | $5,03 \cdot 10^{-4}$ | 4,56 |
| | | 273 | $1,65 \cdot 10^{-3}$ | $2,27 \cdot 10^{-3}$ | $7,04 \cdot 10^{-3}$ | $1,01 \cdot 10^{-3}$ | 14,33 |
| II | Acetaldehyd + Methanol | 298 | $6,79 \cdot 10^{-4}$ | $9,25 \cdot 10^{-4}$ | $1,87 \cdot 10^{-3}$ | $8,56 \cdot 10^{-4}$ | 11,24 |
| | | 273 | $2,18 \cdot 10^{-3}$ | $2,76 \cdot 10^{-3}$ | $5,65 \cdot 10^{-3}$ | $2,34 \cdot 10^{-3}$ | 39,87 |
| | | 253 | $6,52 \cdot 10^{-2}$ | $7,75 \cdot 10^{-2}$ | $1,60 \cdot 10^{-1}$ | $6,05 \cdot 10^{-2}$ | 103,1 |
| II | Acetaldehyd + Ethanol | 298 | $2,73 \cdot 10^{-4}$ | $4,35 \cdot 10^{-4}$ | $1,25 \cdot 10^{-3}$ | $3,64 \cdot 10^{-4}$ | 4,70 |
| | | 273 | $8,74 \cdot 10^{-4}$ | $1,13 \cdot 10^{-3}$ | $3,86 \cdot 10^{-3}$ | $9,30 \cdot 10^{-4}$ | 14,81 |
| II | Acetaldehyd + 1-Propanol | 298 | $4,62 \cdot 10^{-4}$ | $7,92 \cdot 10^{-4}$ | $2,04 \cdot 10^{-3}$ | $4,07 \cdot 10^{-4}$ | 4,56 |
| | | 273 | $1,35 \cdot 10^{-3}$ | $1,86 \cdot 10^{-3}$ | $5,77 \cdot 10^{-3}$ | $8,25 \cdot 10^{-4}$ | 14,33 |
| III | Acetaldehyd + Methanol | 298 | $8,24 \cdot 10^{-4}$ | $1,12 \cdot 10^{-3}$ | $2,28 \cdot 10^{-3}$ | $1,04 \cdot 10^{-3}$ | 11,24 |
| | | 273 | $2,64 \cdot 10^{-3}$ | $3,36 \cdot 10^{-3}$ | $6,86 \cdot 10^{-3}$ | $2,85 \cdot 10^{-3}$ | 39,87 |
| | | 253 | $7,93 \cdot 10^{-2}$ | $9,42 \cdot 10^{-2}$ | $1,94 \cdot 10^{-1}$ | $7,35 \cdot 10^{-2}$ | 103,1 |
| III | Acetaldehyd + Ethanol | 298 | $3,83 \cdot 10^{-4}$ | $6,10 \cdot 10^{-4}$ | $1,76 \cdot 10^{-3}$ | $5,10 \cdot 10^{-4}$ | 4,70 |
| | | 273 | $1,22 \cdot 10^{-3}$ | $1,58 \cdot 10^{-3}$ | $5,40 \cdot 10^{-3}$ | $1,30 \cdot 10^{-3}$ | 14,81 |
| III | Acetaldehyd + 1-Propanol | 298 | $5,59 \cdot 10^{-4}$ | $9,59 \cdot 10^{-4}$ | $2,46 \cdot 10^{-3}$ | $4,93 \cdot 10^{-4}$ | 4,56 |
| | | 273 | $1,63 \cdot 10^{-3}$ | $2,24 \cdot 10^{-3}$ | $6,96 \cdot 10^{-3}$ | $9,95 \cdot 10^{-4}$ | 14,33 |

Für alle Varianten und für alle Dampfdruckmethoden ist zu beobachten, dass die bei 273 K berechneten Werte um den Faktor zwei bis drei größer sind als die für 298 K berechneten Werte. Dies entspricht sehr gut der Tendenz der experimentellen Ergebnisse, dass die Werte der Gleichgewichtskonstanten beim Wechsel der Temperatur von 298 K auf 273 K etwa um den Faktor drei ansteigen.

Für das System aus Acetaldehyd und Methanol steigt beim Wechsel der Temperatur von 273 K auf 253 K der Wert der berechneten Gleichgewichtskonstanten um den Faktor 30, der Wert der experimentellen Gleichgewichtskonstanten nur um den Faktor 2,5 an.

Die Verhältnisse der berechneten Gleichgewichtskonstanten zueinander sind mit allen drei Varianten sowohl bei 273 K als auch bei 298 K gleich: Nach der Umrechnung mit den Dampfdruckmethoden von Marrero/Gani, Constantinou/Gani sowie Joback/Reid sind die Werte der Gleichgewichtskonstanten für die Bildung von 1-Propoxyethanol größer als die für die Bildung von 1-Ethoxyethanol. Mit der Methode von Joback/Reid ist der Wert der Gleichgewichtskonstanten für die Reaktion von Acetaldehyd mit 1-Propanol größer als für die Reaktion mit Methanol. Nur mit der Dampfdruckberechnung nach Wilson wird die richtige Reihenfolge der Werte der Gleichgewichtskonstanten erhalten.

Die Abweichungen der Werte der berechneten Gleichgewichtskonstanten in Bezug auf die experimentell bestimmten Werte liegen bei 273 K im Bereich von drei bis vier Größenordnungen und damit im selben Bereich wie bei 298 K.

Für das System aus Acetaldehyd und Methanol liegen die Abweichungen bei 253 K nur im Bereich von zwei bis drei Größenordnungen.

Der Einfluss der Temperatur auf die Werte der Gleichgewichtskonstanten kann mit B3LYP 6-31G(d) scale und der Auswertung mit Variante II sowohl in den untersuchten Systemen aus aliphatischen Aldehyden mit Methanol als auch in den Systemen aus Acetaldehyd und den ausgewählten Alkoholen qualitativ korrekt beschrieben werden. Die Auswertungen mit Variante I und Variante III können den Temperatureinfluss in den Systemen aus aliphatischen Alkoholen mit Methanol nicht so gut beschreiben wie Variante II. Mit B3LYP cc-pVTZ scale kann der Temperatureinfluss in den Systemen aus Acetaldehyd und Alkoholen qualitativ ebenfalls gut beschrieben werden, die berechneten Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten weichen aber unverändert stark von den experimentell bestimmten Werten ab. Mit beiden ausgewählten Basissätzen und in allen drei Varianten wird nur mit der Dampfdruckmethode von Wilson die Abnahme der Reaktivität mit Zunahme der Alkylkettenlänge des Alkohols qualitativ korrekt beschrieben.

6 Zusammenfassung

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden Reaktionen untersucht, die in Mischungen aus Aldehyden und Alkoholen ablaufen. Dabei handelt es sich um die Bildung von Halb- bzw. Vollacetalen. Die Gleichgewichtskonstanten für die Bildung von Halbacetalen wurden sowohl experimentell als auch mit Hilfe von quantenchemischen Methoden untersucht.

Die Gleichgewichtskonstanten wurden experimentell mit der NMR-Spektroskopie für Systeme aus sieben Aldehyden und drei Alkoholen bestimmt. Es wurden ^{13}C -Spektren von Einsatzmischungen verschiedener Konzentration von allen untersuchten 21 Systemen aufgenommen. Die Experimente fanden bei drei Temperaturen statt (298 K, 273 K und 253 K).

Aus den ^{13}C -Spektren wurden die konzentrationsabhängigen Pseudogleichgewichtskonstanten K_x bestimmt. Die Auswertung der einzelnen Signale der Spektren ist umso genauer, je ähnlicher die Flächeninhalte der Signale von Edukten und Produkten sind. Die NMR-Signale von Mischungen, in denen einer der Stoffe nur in sehr kleiner Konzentration auftritt, können nicht zuverlässig integriert werden.

Die konzentrationsabhängigen Pseudogleichgewichtskonstanten K_x sollten mit Hilfe eines Korrekturbeitrags (dem Beitrag aus den Aktivitätskoeffizienten, K_γ) zu einer konzentrationsunabhängigen Gleichgewichtskonstanten K umgerechnet werden. Die dazu benötigten Aktivitätskoeffizienten wurden mit der Gruppenbeitragsmethode „modified UNIFAC Dortmund“ berechnet. Allerdings zeigte sich, dass die Berücksichtigung von K_γ nicht zu einer Annäherung der Zahlenwerte für die Gleichgewichtskonstante K führt. Deshalb wurde für den weiteren Vergleich auf eine Berücksichtigung von K_γ verzichtet.

Als quantenchemische Methode wurde der Dichtefunktionaltheorieansatz B3LYP gewählt, der für die Berechnungen sowohl mit dem kleinen Pople-Basissatz 6-31G(d) scale als auch mit dem größeren Dunning-Basissatz cc-pVTZ scale kombiniert wurde. Aus zeitlichen Gründen konnten, insbesondere für den größeren Basissatz, nicht alle experimentell untersuchten Reaktionen betrachtet werden. Es wurden nur die Gleichgewichtskonstanten für die Bildung der Halbacetale 1 aus Aldehyd und Alkohol betrachtet. Es wurden Berechnungen bei 298 K und 273 K durchgeführt. Für das System aus Acetaldehyd und Methanol fanden zusätzlich Rechnungen bei 253 K statt.

Mit dem kleineren Basissatz 6-31G(d) scale wurden für die im Experiment verwendeten sieben Aldehyde und drei Alkohole sowie für 15 Halbacetale 1 versucht, möglichst alle Konformere der untersuchten Moleküle zu bestimmen. Für den größeren Basissatz cc-pVTZ wurden dieselben Moleküle wie mit dem Basissatz 6-31G(d)

scale berechnet. Aus Zeitgründen konnten für einige (größere) Halbacetale 1 nur die Konformere mit der geringsten Energie berechnet werden.

Da es mehrere Möglichkeiten gibt, die verschiedenen Konformere eines Moleküls zu berücksichtigen, wurden in der vorliegenden Arbeit drei Varianten verwendet: Variante I verwendet nur die Konformere mit der geringsten Energie der an der Reaktion teilnehmenden Stoffe. Variante II verwendet zur Berechnung der Gleichgewichtskonstanten die gemittelte Gibbsche Energie der ausgewählten Konformere und Variante III berechnet die Gleichgewichtskonstante einer Reaktion aus den gewichteten Gleichgewichtskonstanten aller Konformerkombinationen.

Die quantenchemischen Berechnungen fanden für Reaktionen in der Gasphase statt. Um die berechneten Werte der Gleichgewichtskonstanten mit den experimentellen Daten vergleichen zu können, wurden diese Gleichgewichtskonstanten K_{Gas} mit Hilfe der Dampfdrücke der reinen Komponenten auf die flüssige Phase umgerechnet.

Die mit B3LYP 6-31G(d) scale berechneten Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten in der Gasphase sind je nach System um bis zu vier Größenordnungen kleiner als die experimentell bestimmten Werte in der flüssigen Phase. Nach der Umrechnung der Gasphasenwerte auf die flüssige Phase wird der Unterschied um etwa eine Größenordnung kleiner. Für die Systeme mit Acetaldehyd liegt beispielsweise der Unterschied zwischen den experimentellen und den berechneten Zahlenwerten bei einer Größenordnung; die Systeme mit 2-Chlorbenzaldehyd weisen einen Unterschied von drei Größenordnungen auf.

Die beste Übereinstimmung der Zahlenwerte von Experiment und Rechnung wird für alle untersuchten Systeme, unabhängig von der Variante, nach der Umrechnung der Werte mit der Methode von Joback/Reid ermittelt.

Der Vergleich der Zahlenwerte der experimentell bestimmten Gleichgewichtskonstanten $K_{x,50/50}$ mit den berechneten Werten zeigt, dass nur die mit Variante II berechneten Werte, in Kombination mit den Dampfdruckberechnungen nach Marrero/Gani, Constantinou/Gani und Wilson, die Tendenzen von $K_{x,50/50}$ bei Zunahme der Alkylkettenlänge des Aldehyds qualitativ korrekt beschreiben.

Die Dampfdruckberechnung nach Joback/Reid führt zwar zu Zahlenwerten der Gleichgewichtskonstanten, die eine deutlich geringere Abweichung zu den experimentellen Werten besitzen als die Werte der anderen Methoden, kann aber die im Experiment beobachtete Reihenfolge der Gleichgewichtskonstanten nicht wiedergeben.

Der Einfluss der Alkylkettenlänge des Alkohols auf den Wert der berechneten Gleichgewichtskonstanten kann, unabhängig von der Variante, nur mit der Methode von Wilson qualitativ beschrieben werden: Der Zahlenwert der Gleichgewichtskonstanten nimmt mit zunehmender Alkylkettenlänge des Alkohols ab.

Die Auswertung mit Variante II, kombiniert mit der Dampfdruckmethode von Wilson, kann am besten die Tendenzen der experimentellen Gleichgewichtskonstanten sowohl bei der Änderung der Kettenlänge des Aldehyds als auch der Änderung der Kettenlänge des Alkohols abbilden. Im Gegensatz dazu liefern Variante I und Variante III nach der Umrechnung auf die flüssige Phase mit der Dampfdruckme-

thode von Joback/Reid die besten Übereinstimmungen der Zahlenwerte zwischen Experiment und Berechnungen.

Die Zahlenwerte, die mit der Kombination aus B3LYP und 6-31G(d) scale berechnet werden, stimmen z. T. gut mit den experimentellen Werten überein. Die überraschend guten Ergebnisse mit dem kleinen Basissatz 6-31G(d) sind wahrscheinlich eine Folge der Kompensation verschiedener vereinfachender Annahmen.

Die Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten, die mit B3LYP cc-pVTZ scale berechnet wurden, sind je nach System und gewählter Variante um drei bis sechs Größenordnungen kleiner als die experimentell bestimmten Werte. Die größten Abweichungen zwischen Experiment und Rechnung treten auch für den größeren Basissatz für das System mit dem aromatischen Aldehyd 2-Chlorbenzaldehyd auf. Die Analyse der Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten zeigt, dass nur durch die Auswertung mit Variante I nach der Umrechnung mit Marrero/Gani, bzw. Constantinou/Gani und Wilson, der experimentell beobachtete Einfluss der Länge der Alkylkette des Aldehyds auf den Zahlenwert der Gleichgewichtskonstanten qualitativ korrekt beschrieben wird. Der Einfluss der Alkylkettenlänge des Alkohols auf den Wert der Gleichgewichtskonstanten kann in allen drei Varianten nur mit der Dampfdruckmethode von Wilson qualitativ korrekt beschrieben werden.

Die Abweichungen der Werte der Gleichgewichtskonstanten zwischen den verschiedenen Methoden der Dampfdruckberechnung ist in allen hier untersuchten Fällen deutlich kleiner als die Abweichung zu den experimentellen Werten. Der Einfluss der Dampfdruckmethode auf die Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten spielt in Bezug auf die sehr großen Abweichungen zu den experimentellen Werten fast keine Rolle.

Die Methode B3LYP mit dem Basissatz cc-pVTZ ist, unabhängig von der Variante und der gewählten Methode der Dampfdruckberechnung, nicht in der Lage, die Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten der untersuchten Reaktionen quantitativ zu beschreiben.

Die Methode B3LYP, kombiniert mit dem Basissatz 6-31G(d), kann in der Auswertung mit Variante II den Temperatureinfluss auf die Werte der Gleichgewichtskonstanten sowohl in den untersuchten Systemen aus aliphatischen Aldehyden mit Methanol als auch in den Systemen aus Acetaldehyd und den ausgewählten Alkoholen gut beschreiben.

Der Einfluss der Temperatur in den Systemen aus Acetaldehyd und Alkoholen kann mit B3LYP cc-pVTZ scale qualitativ ebenfalls gut beschrieben werden, die berechneten Zahlenwerte der Gleichgewichtskonstanten weichen aber stark (drei bis vier Größenordnungen) von den experimentellen Werten ab. Die Abnahme der Reaktivität mit Zunahme der Alkylkette des Alkohols wird, mit beiden Basissätzen in allen drei Varianten, nur mit der Dampfdruckberechnung nach Wilson qualitativ korrekt beschrieben.

7 Literaturverzeichnis

- [AFL88] ABRAHAM, R.J., J. FISHER und P. LOFTUS: *Introduction to NMR Spectroscopy*. Wiley, 2. Auflage, 1988.
- [Alb98] ALBERT, MICHAEL: *Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichte, Enthalpien und Reaktionskinetik in formaldehydhaltigen Mischungen*. Dissertation, Fachbereich Maschinenbau und Verfahrenstechnik, Universität Kaiserslautern, (1998).
- [AT91] ALMLOF, J. und P. R. TAYLOR: *test*. Adv. Quant. Chem. 22, 301, 1991.
- [AU05] ANDERSSON, M. P. und P. UVDAL: *New Scale Factors for Harmonic Vibrational Frequencies Using the B3LYP Density Functional Method with the Triple- ζ Basis Set 6-311+G(d,p)*. J. Phys. Chem. A, 109, 2937-2941, 2005.
- [BC51] BELL, RONALD PERCY und J.C. CLUNIE: *The hydration of acetaldehyde in aqueous solution*. Transaction of the Faraday Society, 1951.
- [Bec86] BECKE, AXEL D.: *Density functional calculations of molecular bond energies*. J. Chem. Phys., 84, 4524, 1986.
- [Bec88] BECKE, AXEL D.: *Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior*. Phys. Rev. A, 38, 3098-3100, 1988.
- [Bec93] BECKE, AXEL D.: *Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange*. J. Chem. Phys., 98, 5648-5652, 1993.
- [Bei97] BEILSTEIN: *Beilstein: Handbook of Organic Chemistry*. Springer-Verlag, 4. Auflage, 1997.
- [BH98] BOHR, FRÉDÉRIK und ERIC HENON: *Comparison of various quantum chemistry methods for the computation of equilibrium constants*. J. Phys. Chem. A, 102, 4857-4862, 1998.
- [Böt05] BÖTTINGER, W.: *NMR-spektroskopische Untersuchung der Reaktivabsorption von Kohlendioxid in wässrigen Aminlösungen*. Dissertation, Institut für Technische Thermodynamik und Thermische Verfahrenstechnik, Universität Stuttgart, 2005.
- [BW88] BEYER, HANS und WOLFGANG WALTER: *Lehrbuch der organischen Chemie*. Hirzel Verlag, 21. Auflage, 1988.

- [CG94] CONSTANTINOU, L. und RAFIQUUL GANI: *New Group Contribution Method for Estimating Properties of Pure Compounds*. AIChE J., 40, 1697-1710, 1994.
- [Cla99] CLARIDGE, TIMOTHY D. W.: *High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry*. Pergamon, 1. Auflage, 1999.
- [CRP05] CSONKA, GÁBOR I., ADRIENN RUZSINSZKY und JOHN P. PERDEW: *Estimation, Computation and Experimental Correction of Molecular Zero-Point Vibrational Energies*. J. Phys. Chem. A, 109, 6779-6789, 2005.
- [Dah01] DAHL, JENS P.: *Introduction to the quantum world of atoms and molecules*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 1. Auflage, 2001.
- [DHP71] DITCHFIELD, R., W.J. HEHRE und J.A. POPLE: *Self-Consistent Molecular Orbital Methods. 9. Extended Gaussian-type basis for molecular-orbital studies of organic molecules*. J. Chem. Phys. 54, 724, 1971.
- [DT77] DEWAR, M. J. S. und W. THIEL: *Ground-States of Molecules. 38. The MNDO Method: Approximations and Parameters*. J. Am. Chem. Soc., 99, 4899-4907, 1977.
- [Dun89] DUNNING, T.H.: *Gaussian basis sets for use in correlated molecular calculations. I. The atoms boron through neon and hydrogen*. J. Chem. Phys., 90, 1007-1023, 1989.
- [DZH85] DEWAR, M. J. S., E. G. ZOEBISCH und E. F. HEALY: *AM1: A New General Purpose Quantum Mechanical Molecular Model*. J. Am. Chem. Soc., 107, 3902-3909, 1985.
- [FF68] FIESER, LOUIS F. und MARY FIESER: *Organische Chemie*. Verlag Chemie, 2. Auflage, 1968.
- [FF96] FORESMAN, JAMES B. und AELEEN FRISCH: *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods*. Gaussian, Inc., 2. Auflage, 1996.
- [FGR77] FREDENSLUND, Å., J. GMEHLING und P. RASMUSSEN: *Vapor-Liquid Equilibria Using UNIFAC - A Group Contribution Method*. Elsevier, 1. Auflage, 1977.
- [Fri] FRISCH, AELEEN: *When Is a Minimum Not a Minimum?* <http://chembionews.cambridgesoft.com/art.cfm?S=155>.
- [Fri99] FRIEBOLIN, HORST: *Ein- und zweidimensionale NMR-Spektroskopie*. Wiley-VCH, 3. Auflage, 1999.
- [FT97] FILATOV, M. und W. THIEL: *A new gradient-corrected exchange-correlation density functional*. Mol. Phys., 91, 847-859, 1997.

- [GJS91] GREV, ROGER S., CURTIS L. JANSSEN und HENRY F. SCHAEFER: *Concerning zero-point vibrational energy corrections to electronic energies*. J. Chem. Phys., 95, 5128-5132, 1991.
- [GLJ⁺98] GMEHLING, J., J. LOHMANN, A. JAKOB, JIDING LI und R. JOH: *A modified UNIFAC (Dortmund) Model, 3. Revision and Extension*. Ind.Eng.Chem.Res., 37, 4876-4882, 1998.
- [GLS93] GMEHLING, J., J. LI und M. SCHILLER: *A Modified UNIFAC Model 2. Present Parameter Matrix and Results for Different Thermodynamic Properties*. Ind.Eng.Chem.Res., 32, 178-193, 1993.
- [Gün92] GÜNTHER, HARALD: *NMR-Spektroskopie*. Georg Thieme Verlag Stuttgart, 3. Auflage, 1992.
- [Gre05] GREINER, WALTER: *Quantenmechanik*. Harri Deutsch, 6. Auflage, 2005.
- [GTS⁺04a] GAUSSIAN 03, REVISION C.02, M. J. FRISCH, G. W. TRUCKS, H. B. SCHLEGEL, G. E. SCUSERIA, M. A. ROBB, J. R. CHEESEMAN, J. A. MONTGOMERY, JR., T. VREVEN, K. N. KUDIN, J. C. BURANT, J. M. MILLAM, S. S. IYENGAR, J. TOMASI, V. BARONE, B. MENNUCCI, M. COSSI, G. SCALMANI, N. REGA, G. A. PETERSSON, H. NAKATSUJI, M. HADA, M. EHARA, K. TOYOTA, R. FUKUDA, J. HASEGAWA, M. ISHIDA, T. NAKAJIMA, Y. HONDA, O. KITAO, H. NAKAI, M. KLENE, X. LI, J. E. KNOX, H. P. HRATCHIAN, J. B. CROSS, V. BAKKEN, C. ADAMO, J. JARAMILLO, R. GOMPERTS, R. E. STRATMANN, O. YAZYEV, A. J. AUSTIN, R. CAMMI, C. POMELLI, J. W. OCHTERSKI, P. Y. AYALA, K. MOROKUMA, G. A. VOTH, P. SALVADOR, J. J. DANNENBERG, V. G. ZAKRZEWSKI, S. DAPPRICH, A. D. DANIELS, M. C. STRAIN, O. FARKAS, D. K. MALICK, A. D. RABUCK, K. RAGHAVACHARI, J. B. FORESMAN, J. V. ORTIZ, Q. CUI, A. G. BABOUL, S. CLIFFORD, J. CIOSLOWSKI, B. B. STEFANOV, G. LIU, A. LIASHENKO, P. PISKORZ, I. KOMAROMI, R. L. MARTIN, D. J. FOX, T. KEITH, M. A. AL-LAHAM, C. Y. PENG, A. NANAYAKKARA, M. CHALLACOMBE, P. M. W. GILL, B. JOHNSON, W. CHEN, M. W. WONG, C. GONZALEZ und J. A. POPLE: *Gaussian, Inc.*, Wallingford CT, 2004.
- [GTS⁺04b] GAUSSIAN 03, REVISION E.01, M. J. FRISCH, G. W. TRUCKS, H. B. SCHLEGEL, G. E. SCUSERIA, M. A. ROBB, J. R. CHEESEMAN, J. A. MONTGOMERY, JR., T. VREVEN, K. N. KUDIN, J. C. BURANT, J. M. MILLAM, S. S. IYENGAR, J. TOMASI, V. BARONE, B. MENNUCCI, M. COSSI, G. SCALMANI, N. REGA, G. A. PETERSSON, H. NAKATSUJI, M. HADA, M. EHARA, K. TOYOTA, R. FUKUDA, J. HASEGAWA, M. ISHIDA, T. NAKAJIMA, Y. HONDA, O. KITAO, H. NAKAI, M. KLENE, X. LI, J. E. KNOX, H. P. HRATCHIAN, J. B. CROSS, V. BAKKEN, C. ADAMO, J. JARAMILLO, R. GOMPERTS,

- R. E. STRATMANN, O. YAZYEV, A. J. AUSTIN, R. CAMMI, C. POMELLI, J. W. OCHTERSKI, P. Y. AYALA, K. MOROKUMA, G. A. VOTH, P. SALVADOR, J. J. DANNENBERG, V. G. ZAKRZEWSKI, S. DAPPRICH, A. D. DANIELS, M. C. STRAIN, O. FARKAS, D. K. MALICK, A. D. RABUCK, K. RAGHAVACHARI, J. B. FORESMAN, J. V. ORTIZ, Q. CUI, A. G. BABOUL, S. CLIFFORD, J. CIOSLOWSKI, B. B. STEFANOV, G. LIU, A. LIASHENKO, P. PISKORZ, I. KOMAROMI, R. L. MARTIN, D. J. FOX, T. KEITH, M. A. AL-LAHAM, C. Y. PENG, A. NANAYAKKARA, M. CHALLACOMBE, P. M. W. GILL, B. JOHNSON, W. CHEN, M. W. WONG, C. GONZALEZ und J. A. POPLE: *Gaussian, Inc.*, Wallingford CT, 2004.
- [Has90] HASSE, HANS: *Thermodynamische Eigenschaften formaldehydhaltiger Mischungen*. Dissertation, Fachbereich Maschinenbau und Verfahrenstechnik, Universität Kaiserslautern, 1990.
- [HDP72] HEHRE, W.J., R. DITCHFIELD und J.A. POPLE: *Self-Consistent Molecular Orbital Methods. 12. Further extensions of Gaussian-type basis sets for use in molecular-orbital studies of organic-molecules*. J. Chem. Phys. 56, 2257, 1972.
- [HK33] HEROLD-KIEL, W.: *Halbacetal- und Hydratbildung der Carbonyl- und Carboxylderivate*. Zeitschrift Elektrochemie, 1933.
- [HK64] HOHENBERG, P. und W. KOHN: *Inhomogeneous Electron Gas*. Phys. Rev. B, 136, 864-871, 1964.
- [Hén67] HÉNAFF, P. LE: *Sur les équilibres et les vitesses d'hydratation et d'hémiacétalisation des aldéhydes aliphatiques*. C. R. Acad. Sci., 1967.
- [Hén68] HÉNAFF, P. LE: *Méthodes d'étude et propriétés des hydrates, hemiacetals et hemithioacetals dérivés des aldéhydes et des cétones*. P. Bull. Soc. Chim., 1968.
- [Hoo67] HOOPER, D.L.: *Nuclear magnetic resonance measurements of equilibria involving hydration and hemiacetal formation from some carbonyl compounds*. J.Chem.Soc.B, 169-170, 1967.
- [HRSP86] HEHRE, WARREN, LEO RADOM, P.V. SCHLEYER und JOHN POPLE: *AB INITIO Molecular Orbital Theory*. Wiley-Interscience, 1. Auflage, 1986.
- [HW31] HEROLD, W. und K.L. WOLF: *Optische Untersuchungen am System Aldehyd - Alkohol*. Zeitschrift für physikalische Chemie, 77, 284, 1931.
- [Jen07] JENSEN, FRANK: *Introduction to computational chemistry*. John Wiley & Sons, Ltd, 2. Auflage, 2007.
- [JPBV78] JEFFREY, G.A., J.A. POPLE, J.S. BINKLEY und S. VISHVESHWARA: *Application of ab initio molecular orbital calculations to the structural moieties of carbohydrates*. J. Am. Chem. Soc., 100, 373-376, 1978.

- [JR87] JOBACK, K.G. und ROBERT C. REID: *Estimation of Pure-Component Properties from Group-Contributions*. Chem.Eng.Commun., 57, 233-243, 1987.
- [KBB84] KALINOWSKI, HANS-OTTO, STEFAN BERGER und SIEGMAR BRAUN: *¹³C-NMR-Spektroskopie*. Georg Thieme Verlag Stuttgart, 1. Auflage, 1984.
- [KH01] KOCH, WOLFRAM und MAX C. HOLTHAUSEN: *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*. Wiley-VCH Verlag, 2. Auflage, 2001.
- [Kir83] KIRBY, A.J.: *The anomeric effect and related stereoelectronic effects at oxygen*. Springer, 1. Auflage, 1983.
- [Kle92] KLEINPETER, E.: *NMR-Spektroskopie - Struktur, Dynamik und Chemie des Moleküls*. Barth, 1. Auflage, 1992.
- [KS65] KOHN, W. und L. J. SHAM: *Self-consistent equations including exchange and correlation effects*. Phys. Rev. A, 140, 1133-1138, 1965.
- [Kuh03] KUHNERT, CHRISTIAN: *Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichte in mehrkomponentigen formaldehydhaltigen Systemen*. Dissertation, Fachbereich Maschinenbau und Verfahrenstechnik, Universität Kaiserslautern, (2003).
- [LCH05] LIU, MIN HSIEN, CHENG CHEN und YAW SHUN HONG: *Improved modification for the density-functional theory calculation of thermodynamic properties for C-H-O composite compounds*. J. Chem. Phys., 122, 064312-064312-6, 2005.
- [LYP88] LEE, C., W. YANG und R.G. PARR: *Development of the colle-salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density*. Phys. Rev. B, 37, 785, 1988.
- [MG01a] MARRERO, JORGE und RAFIQU L GANI: *Group-contribution based estimation of pure component properties*. Fluid Phase Equilibria, 183-184, 183-208, 2001.
- [MG01b] MARRERO, JORGE und RAFIQU L GANI: *ProPred 3.0 Manual*. <http://www.capec.kt.dtu.dk>, 2001.
- [MMR07] MERRICK, JEFFREY P., DAMIAN MORAN und LEO RADOM: *An Evaluation of Harmonic Vibrational Frequency Scale Factors*. J. Phys. Chem. A, 111, 11683-11700, 2007.
- [Mor94] MORGAN, KATHLEEN: *Thermochemistry of carbonyl compounds: hydrate, hemiacetal and acetal formation reactions*. Dissertation, Yale University, 1994.
- [Nol04] NOLTING, WOLFGANG: *Grundkurs Theoretische Physik 5*. Springer, 6. Auflage, 2004.

- [Och00] OCHTERSKI, JOSEPH W.: *Thermochemistry in Gaussian*. Gaussian, Inc., 2000.
- [Per86] PERDEW, J.P.: *Density-functional approximation for the correlation energy of the inhomogeneous electron gas*. Phys. Rev. B, 33, 8822-8824, 1986.
- [Pes00] PESCHLA, ROGER: *Untersuchungen zum Stofftransport über Flüssig-Flüssig-Phasengrenzflächen formaldehydhaltiger, chemisch reagierender Systeme*. Dissertation, Fachbereich Maschinenbau und Verfahrenstechnik, Universität Kaiserslautern, 2000.
- [PW86] PERDEW, J.P. und Y. WANG: *Accurate and simple density functional for the electronic exchange energy: Generalized gradient approximation*. Phys. Rev. B 33, 8800 - 8802, 1986.
- [PY92] PERDEW, J.P. und Y. WANG: *Accurate and simple analytic representation of the electron gas correlation energy*. Phys. Rev. B, 45, 13244, 1992.
- [Rag00] RAGHAVACHARI, KRISHNAN: *Perspective on Density functional thermochemistry. III. The role of exact exchange*. Theor. Chem. Acc., 103, 361-363, 2000.
- [RPP77] REID, ROBERT C., JOHN M. PRAUSNITZ und BRUCE E. POLING: *The Properties of Gases and Liquids*. McGraw-Hill Companies, 3. Auflage, 1977.
- [RW99] RAYMOND, KEVIN S. und RALPH A. WHEELER: *Compatibility of correlation-consistent basis sets with a hybrid Hartree-Fock/density functional method*. J. Comput. Chem., 20, 207-216, 1999.
- [SBG⁺04] SINHA, PANKAJ, SCOTT E. BOESCH, CHANGMING GU, RALPH A. WHEELER und ANGELA K. WILSON: *Harmonic Vibrational Frequencies: Scaling Factors for HF, B3LYP, and MP2 Methods in Combination with Correlation Consistent Basis Sets*. J. Phys. Chem. A, 108, 9213-9217, 2004.
- [Sch] SCHAFTENAAR, GIJS: <http://www.cmbi.ru.nl/molden/>.
- [Sch26] SCHRÖDINGER, E.: *Quantisierung als Eigenwertproblem*. Annalen der Physik, 79, 361-376, 1926.
- [SHA92] SCHÄFER, A., H. HORN und R. AHLRICHS: *Fully optimized contracted Gaussian basis sets for atoms Li to Kr*. J. Chem. Phys. 97, 2571, 1992.
- [SHA94] SCHÄFER, A., C. HUBER und R. AHLRICHS: *Fully optimized contracted Gaussian basis sets of triple zeta valence quality for atoms Li to Kr*. J. Chem. Phys. 100, 5829, 1994.

- [Sie96] SIEDER, G.: *NMR-spektroskopische Untersuchungen von chemischen Gleichgewichten und reaktionskinetischen Vorgängen in Ameisensäurehaltigen und in formaldehydhaltigen Systemen*. Diplomarbeit, Lehrstuhl für Technische Thermodynamik, Universität Kaiserslautern, 1996.
- [SM99] SIMON, JOHN und DONALD MCQUARRIE: *Molecular Thermodynamics*. Univ Science Books, 1. Auflage, 1999.
- [SO82] SZABO, ATTILA und NEIL S. OSTLUND: *Modern quantum chemistry*. Dover Publications, Inc. Mineola, New York, 1. Auflage, 1982.
- [SR96] SCOTT, A.P. und L. RADOM: *Harmonic vibrational frequencies: an evaluation of Hartree-Fock, Møller-Plesset, quadratic configuration interaction, density functional theory, and semiempirical scale factors*. J. Phys. Chem., 100, 16502-16513, 1996.
- [Ste89] STEWART, J. J. P.: *Optimization of parameters for semiempirical methods. I. Method*. J. Comp. Chem., 10, 209-220, 1989.
- [Syk76] SYKES, PETER: *Reaktionsmechanismen der organischen Chemie*. Weinheim: Verlag Chemie, 7. Auflage, 1976.
- [TPR⁺06] TANTIRUNGROTECHAIA, YUTHANA, KETTHIP PHANASANTA, SUPACHAREE RODDECHAA, PANIDA SURAWATANAWONGA, VALLAYA SUTTHIKHUMB und JUMRAS LIMTRAKULC: *Scaling factors for vibrational frequencies and zero-point vibrational energies of some recently developed exchange-correlation functionals*. J. of Molecular Structure: THEOCHEM, 760, 189-192, 2006.
- [Ull96] ULLMANN: *Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry*. Weinheim, 5. Auflage, 1996.
- [VWN80] VOSKO, S.J., L. WILK und M. NUSAIR: *Accurate spin-dependent electron liquid correlation energies for local spin densities: A critical analysis*. Can. J. Phys., 58, 1200, 1980.
- [WG87] WEIDLICH, U. und J. GMEHLING: *A Modified UNIFAC Model. 1. Prediction of VLE, hE, and gamma Infinite*. Ind.Eng.Chem.Res., 26, 1372-1381, 1987.
- [WJ96] WILSON, G. und L. JASPERSON: *Critical Constants Tc, Pc, Estimation Based on Zero, First and Second-Order Methods*. Paper given at AIChE Spring National Meeting, New Orleans, La., U.S.A, 1996.
- [WM89] WIBERG, K.B. und M.A. MURCKO: *Rotational Barriers. 4. Dimethoxymethane. The Anomeric Effect Revisited*. J. Am. Chem. Soc., 111, 4821-4828, 1989.

- [WMM94] WIBERG, KENNETH, KATHLEEN MORGAN und HENRY MALTZ: *Thermochemical studies of carbonyl reactions. 6. A Study of hydration equilibria.* J. Am. Chem. Soc., 116, 11067-11077, 1994.
- [Won96] WONG, MING WAH: *Vibrational frequency prediction using density functional theory.* Chemical Physics Letters, 256, 391-399, 1996.
- [WS81] WIBERG, K. B. und R. R. SQUIRES: *Thermochemical studies of carbonyl reactions. 2. Steric effects in acetal and ketal hydrolysis.* J. Am. Chem. Soc., 4473, 1981.
- [WWM79] WOLFE, SAUL, MYUNG-HWAN WHANGBO und DAVID MITCHELL: *On the magnitudes and origins of the „anomeric effects“, „exo-anomeric effects“, „reverse anomeric effects“, and C—X and C—Y bond -lengths in XCH₂YH molecules.* Carbohydrate Research, 69, 1-26, 1979.
- [YF83] YAIR, OSNAT BEN und AAGE FREDENSLUND: *Extension of the UNIFAC group-contribution method for the prediction of pure-component vapor pressure.* Ind.Eng.Chem.Process Des.Dev., 22, 433-436, 1983.

8 Anhang

8.1 NMR-Spektroskopie

8.1.1 Verwendete Chemikalien

Tabelle 8.1: Verwendete Chemikalien für NMR-Experimente

| Chemikalien | Hersteller | Reinheit |
|------------------------|----------------------|----------------------------------|
| Methanol | Merck (8.22283.2500) | 99+ |
| Ethanol | Acros Organics | 98 % + 2% MEK |
| 1-Propanol | Acros Organics | 99+ |
| Acetaldehyd | Acros Organics | 99,5 |
| Propanal | Chemikalienausgabe | >97% |
| Butanal | Sigma-Aldrich | ≥99% (20710) |
| Heptanal | Merck (8.06918.0100) | >97% |
| Decanal | Sigma-Aldrich | ≥ 98% |
| 2-Chlorbenzaldehyd | Merck (8.20276.0250) | >98% |
| 3-Phenylpropionaldehyd | Merck (8.04542.0100) | ≥ 97% |
| Chloroform | EURISO-TOP W1921 | 98,80% D-H ₂ O < 0,01 |

8.1.2 NMR-Programm

;1D sequence with inverse gated decoupling
;using 30 degree flip angle

include <Avance.incl>

d11=30m

1 ze

d11 pl12:f2

2 30m do:f2

d1

p1*0.33 ph1

go=2 ph31 cpd2:f2

30m do:f2 mc 0 to 2 F0(zd)

exit

ph1=0 2 2 0 1 3 3 1
 ph31=0 2 2 0 1 3 3 1

;pl1 : f1 channel - power level for pulse (default)
 ;pl12: f2 channel - power level for CPD/BB decoupling
 ;p1 : f1 channel - 90 degree high power pulse
 ;d1 : relaxation delay; 1-5 * T1
 ;d11: delay for disk I/O [30 msec]
 ;NS: 1 * n, total number of scans: NS * TD0
 ;cpd2: decoupling according to sequence defined by cpdprg2
 ;pcpd2: f2 channel - 90 degree pulse for decoupling sequence

;Id : zgig30, v1.7 2002/06/12 09 : 05 : 24 *ber Exp*

8.1.3 NMR-Spektren

8.1.3.1 Acetaldehyd + Methanol

295 K

Tabelle 8.2: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 40,8 Mol% Acetaldehyd und 59,2 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Acetaldehyd

| Acetaldehyd | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|---------------------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | 1,01±0,01 | 3,78 | 3,78 | 4,847 | 4,882±0,035 | 0,1035 | 0,102±0,01 | 0,038 | 0,034± $^{0,004}_{0,006}$ |
| 1,02 | | | | 4,917 | | 0,089 | | 0,038 | |
| | | | | | | 0,101 | | 0,029 | |
| | | | | | | 0,103 | | 0,066 | |
| | | | | | | 0,112 | | 0,036 | |

Tabelle 8.3: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 40,8 Mol% Acetaldehyd und 59,2 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Acetaldehyd | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|-----------|---------------------------|-----------|---------------------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,264 | 0,267±0,004 | 1,0 | 1,0 | 1,276 | 1,286±0,01 | 0,027 | 0,027± $^{0,004}_{0,003}$ | 0,010 | 0,011± $^{0,003}_{0,001}$ |
| 0,271 | | | | 1,295 | | 0,024 | | 0,010 | |
| | | | | | | 0,025 | | 0,014 | |
| | | | | | | 0,028 | | 0,019 | |
| | | | | | | 0,030 | | 0,011 | |

Tabelle 8.4: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,8 Mol% Acetaldehyd und 50,2 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Acetaldehyd

| Acetaldehyd | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|--------------|-------------------|----------|-------------|----------------|------------------|---|------------------|----------------------------------|-----------------------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 0,990 | $0,995 \pm 0,005$ | 1,094 | 1,094 | 2,475 2,768 | $2,622 \pm 0,15$ | 0,096 0,087 0,086 0,105 0,101 | $0,095 \pm 0,01$ | 0,038 0,040 0,064 0,033 | $0,035 \pm^{0,005}_{0,003}$ |

Tabelle 8.5: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,8 Mol% Acetaldehyd und 50,2 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Acetaldehyd | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------------|-------------------|----------|-------------|----------------|------------------|---|------------------|----------------------------------|-----------------------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,845 0,850 | $0,847 \pm 0,003$ | 1,0 | 1,0 | 2,089 2,362 | $2,226 \pm 0,14$ | 0,083 0,075 0,073 0,095 0,091 | $0,083 \pm 0,01$ | 0,032 0,034 0,060 0,037 | $0,033 \pm^{0,005}_{0,003}$ |

Tabelle 8.6: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 60,1 Mol% Acetaldehyd und 39,9 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Acetaldehyd

| Acetaldehyd | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|--------------|------------------|----------|-------------|----------------|------------------|---|-----------------------------|---|-----------------------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 0,965 | $0,983 \pm 0,02$ | 0,234 | 0,234 | 0,961 1,060 | $1,011 \pm 0,05$ | 0,066 0,054 0,052 0,069 0,065 | $0,061 \pm^{0,008}_{0,009}$ | 0,026 0,032 0,028 0,035 0,031 | $0,030 \pm^{0,005}_{0,004}$ |

Tabelle 8.7: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 60,1 Mol% Acetaldehyd und 39,9 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Acetaldehyd | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------------|------------------|----------|-------------|----------------|-------------------|---|---------------------------|---|-----------------------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 4,243 4,142 | $4,193 \pm 0,05$ | 1,0 | 1,0 | 4,038 4,440 | $4,239 \pm 0,201$ | 0,279 0,227 0,220 0,288 0,270 | $0,257 \pm^{0,03}_{0,04}$ | 0,115 0,133 0,118 0,156 0,131 | $0,130 \pm^{0,025}_{0,015}$ |

Tabelle 8.12: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 60,1 Mol% Acetaldehyd und 39,9 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Acetaldehyd

| Acetaldehyd | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|--------------|-------------|----------|-------------|----------------|-----------------|----------------------------------|-----------------|---|-----------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 1,021 | 1,011±0,01 | 0,143 | 0,143 | 1,581 1,595 | 1,588±0,007 | 0,205 0,200 0,194 0,214 | 0,203±0,01 | 0,070 0,076 0,077 0,071 0,079 | 0,074±0,005 |

Tabelle 8.13: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 60,1 Mol% Acetaldehyd und 39,9 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Acetaldehyd | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------------|-------------|----------|-------------|------------------|-----------------|----------------------------------|-------------------------|---|---------------------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 6,959 7,031 | 6,995±0,04 | 1,0 | 1,0 | 11,004 11,347 | 11,175±0,171 | 1,425 1,394 1,371 1,514 | 1,426± $^{0,09}_{0,06}$ | 0,493 0,556 0,538 0,528 0,622 | 0,548± $^{0,074}_{0,054}$ |

255 KTabelle 8.14: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,8 Mol% Acetaldehyd und 50,2 Mol% Methanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Acetaldehyd

| Acetaldehyd | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|--------------|-------------|----------|-------------|----------------|-----------------|----------------------------------|---------------------------|---|-------------------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 1,009 | 1,004±0,004 | 2,164 | 2,164 | 13,30 13,89 | 13,59±0,294 | 0,575 0,513 0,547 0,514 | 0,537± $^{0,038}_{0,024}$ | 0,221 0,245 0,226 0,228 0,218 | 0,228± $^{0,02}_{0,01}$ |

Tabelle 8.15: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,8 Mol% Acetaldehyd und 50,2 Mol% Methanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Acetaldehyd | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------------|-------------|----------|-------------|----------------|-----------------|----------------------------------|---------------------------|---|--------------------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,458 0,465 | 0,462±0,004 | 1,0 | 1,0 | 6,030 6,324 | 6,18±0,147 | 0,267 0,242 0,253 0,232 | 0,249± $^{0,019}_{0,016}$ | 0,101 0,116 0,104 0,104 0,104 | 0,106± $^{0,01}_{0,005}$ |

8.1.3.2 Acetaldehyd + Ethanol

295 K

Tabelle 8.16: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus
21,1 Mol% Acetaldehyd und 77,3 Mol% Ethanol
bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Acetaldehyd

| Acetaldehyd | | Ethanol | | HA 1 | |
|--------------|------------------|------------------|--------------------|-----------|-----------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 0,916 | $0,958 \pm 0,04$ | 15,714 16,728 | $16,221 \pm 0,507$ | 4,840 | 4,840 |

Tabelle 8.17: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus
21,1 Mol% Acetaldehyd und 77,3 Mol% Ethanol
bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Acetaldehyd | | Ethanol | | HA 1 | |
|----------------|-------------------|--------------|-------------------|-----------|-----------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,062 0,057 | $0,059 \pm 0,003$ | 1,0 1,067 | $1,033 \pm 0,033$ | 0,303 | 0,303 |

Tabelle 8.18: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 40,3 Mol% Acetaldehyd und
58,5 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Acetaldehyd

| Acetaldehyd | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|--------------|-------------------|----------------|-------------------|-----------|-----------------|----------------------------------|--|----------------------------------|--|
| A_A | \bar{A}_A | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 0,982 | $0,991 \pm 0,009$ | 2,512 2,608 | $2,560 \pm 0,048$ | 2,186 | 2,186 | 0,083 0,087 0,080 0,081 | $0,083 \pm \begin{smallmatrix} 0,004 \\ 0,003 \end{smallmatrix}$ | 0,029 0,041 0,048 0,048 | $0,042 \pm \begin{smallmatrix} 0,006 \\ 0,012 \end{smallmatrix}$ |

Tabelle 8.19: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 40,3 Mol% Acetaldehyd und
58,5 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Acetaldehyd | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------------|-------------------|--------------|-------------------|-----------|-----------------|----------------------------------|-------------------|----------------------------------|--|
| A_A | \bar{A}_A | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,396 0,389 | $0,393 \pm 0,004$ | 1,0 1,029 | $1,014 \pm 0,014$ | 0,847 | 0,847 | 0,033 0,035 0,030 0,031 | $0,032 \pm 0,003$ | 0,012 0,017 0,016 0,019 | $0,016 \pm \begin{smallmatrix} 0,003 \\ 0,004 \end{smallmatrix}$ |

Tabelle 8.24: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 80,2 Mol% Acetaldehyd und 19,4 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Acetaldehyd

| Acetaldehyd | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|--|
| A_A | \bar{A}_A | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | 1,05±0,05 | 0,063 | 0,063±0,001 | 0,191 | 0,191 | 0,017 | 0,019±0,002 | 0,008 | 0,009± ^{0,002} _{0,001} |
| 1,100 | | 0,064 | | | | 0,019 | | 0,008 | |
| | | | | | | 0,020 | | 0,010 | |
| | | | | | | 0,022 | | 0,011 | |
| | | | | | | | | 0,008 | |

Tabelle 8.25: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 80,2 Mol% Acetaldehyd und 19,4 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Acetaldehyd | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|--------------|---------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 15,824 | 16,657±0,833 | 1,0 | 1,01±0,014 | 3,055 | 3,055 | 0,282 | 0,323±0,04 | 0,146 | 0,146±0,009 |
| 17,491 | | 1,028 | | | | 0,326 | | 0,138 | |
| | | | | | | 0,322 | | 0,155 | |
| | | | | | | 0,362 | | 0,155 | |
| | | | | | | | | 0,138 | |

273 K

Tabelle 8.26: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 40,3 Mol% Acetaldehyd und 58,5 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Acetaldehyd

| Acetaldehyd | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|-----------|--|-----------|-----------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | 0,99±0,009 | 5,96 | 5,90±0,053 | 7,93 | 7,95±0,019 | 0,306 | 0,303± ^{0,03} _{0,02} | 0,094 | 0,102±0,01 |
| 0,98 | | 5,85 | | 7,96 | | 0,334 | | 0,100 | |
| | | | | | | 0,293 | | 0,113 | |
| | | | | | | 0,283 | | 0,102 | |
| | | | | | | 0,299 | | | |

Tabelle 8.27: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 40,3 Mol% Acetaldehyd und 58,5 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Acetaldehyd | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|--|
| A_A | \bar{A}_A | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,174 | 0,167±0,007 | 1,0 | 0,99±0,01 | 1,351 | 1,35±0,001 | 0,052 | 0,051±0,007 | 0,017 | 0,020± ^{0,002} _{0,003} |
| 0,160 | | 0,98 | | 1,348 | | 0,058 | | 0,021 | |
| | | | | | | 0,050 | | 0,022 | |
| | | | | | | 0,044 | | 0,021 | |
| | | | | | | 0,051 | | | |

Tabelle 8.28: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 50,1 Mol% Acetaldehyd und 48,9 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Acetaldehyd

| Acetaldehyd | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|-----------|---------------------------|-----------|---------------------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | 0,985±0,016 | 1,189 | 1,174±0,015 | 3,289 | 3,290 | 0,274 | 0,264± $^{0,010}_{0,016}$ | 0,113 | 0,115± $^{0,005}_{0,003}$ |
| 0,969 | | 1,159 | | | | 0,263 | | 0,120 | |
| | | | | | | 0,272 | | 0,112 | |
| | | | | | | 0,249 | | | |

Tabelle 8.29: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 50,1 Mol% Acetaldehyd und 48,9 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Acetaldehyd | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|-----------|---------------------------|-----------|---------------------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,842 | 0,83±0,014 | 1,0 | 0,98±0,018 | 2,70 | 2,70 | 0,231 | 0,224± $^{0,010}_{0,014}$ | 0,095 | 0,096± $^{0,003}_{0,002}$ |
| 0,815 | | 0,965 | | | | 0,221 | | 0,099 | |
| | | | | | | 0,234 | | 0,094 | |
| | | | | | | 0,210 | | | |

Tabelle 8.30: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 60,3 Mol% Acetaldehyd und 38,9 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Acetaldehyd

| Acetaldehyd | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-------------------------|-----------|-----------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | 0,986±0,014 | 0,297 | 0,284±0,013 | 1,368 | 1,368 | 0,192 | 0,181± $^{0,01}_{0,02}$ | 0,079 | 0,076±0,005 |
| 0,971 | | 0,271 | | | | 0,188 | | 0,0712 | |
| | | | | | | 0,183 | | 0,081 | |
| | | | | | | 0,163 | | 0,073 | |

Tabelle 8.31: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 60,3 Mol% Acetaldehyd und 38,9 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Acetaldehyd | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|---------------------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 3,364 | 3,32±0,044 | 1,0 | 0,97±0,033 | 4,75 | 4,66±0,092 | 0,647 | 0,611±0,036 | 0,270 | 0,250± $^{0,023}_{0,037}$ |
| 3,275 | | 0,934 | | 4,57 | | 0,620 | | 0,242 | |
| | | | | | | 0,602 | | 0,273 | |
| | | | | | | 0,575 | | 0,213 | |

255 KTabelle 8.32: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 50,1 Mol% Acetaldehyd und 48,9 Mol% Ethanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Acetaldehyd

| Acetaldehyd | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|-----------|---------------------------|-----------|-----------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | 0,99±0,01 | 1,268 | 1,25±0,017 | 6,226 | 6,25±0,023 | 0,438 | 0,436± $^{0,003}_{0,005}$ | 0,228 | 0,220±0,008 |
| 0,981 | | 1,235 | | 6,272 | | 0,431 | | 0,212 | |
| | | | | | | 0,438 | | | |

Tabelle 8.33: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 50,1 Mol% Acetaldehyd und 48,9 Mol% Ethanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Acetaldehyd | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|-----------|---------------------------|-----------|-----------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,812 | 0,80±0,01 | 1,0 | 0,994±0,006 | 4,964 | 5,02±0,06 | 0,345 | 0,342± $^{0,004}_{0,008}$ | 0,174 | 0,171±0,002 |
| 0,793 | | 0,987 | | 5,077 | | 0,335 | | 0,169 | |
| | | | | | | 0,347 | | | |

8.1.3.3 Acetaldehyd + 1-Propanol

295 K

Tabelle 8.34: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 25,7 Mol% Acetaldehyd und 73,6 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Acetaldehyd

| Acetaldehyd | | 1-Propanol | | HA 1 | |
|-------------|-------------|------------|--------------------------|-----------|-----------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | 0,956±0,044 | 11,878 | 12,337± $^{0,66}_{0,46}$ | 4,403 | 4,403 |
| 0,912 | | 12,997 | | | |
| | | 12,136 | | | |

Tabelle 8.35: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 25,7 Mol% Acetaldehyd und 73,6 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Acetaldehyd | | 1-Propanol | | HA 1 | |
|-------------|-------------|------------|---------------------------|-----------|-----------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,086 | 0,081±0,005 | 1,0 | 1,038± $^{0,065}_{0,038}$ | 0,370 | 0,370 |
| 0,076 | | 1,103 | | | |
| | | 1,011 | | | |

Tabelle 8.36: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 42,0 Mol% Acetaldehyd und 57,4 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Acetaldehyd

| Acetaldehyd | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|-------------|------------|-------------------------|-----------|-----------------|-----------|---------------------------|-----------|---------------------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | 1,014±0,014 | 2,272 | 2,393± $^{0,16}_{0,12}$ | 2,106 | 2,106 | 0,096 | 0,089± $^{0,006}_{0,002}$ | 0,032 | 0,038± $^{0,003}_{0,007}$ |
| 1,027 | | 2,553 | | | | 0,087 | | 0,038 | |
| | | 2,354 | | | | 0,087 | | 0,041 | |
| | | | | | | 0,087 | | 0,042 | |

Tabelle 8.37: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 42,0 Mol% Acetaldehyd und 57,4 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Acetaldehyd | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|-------------------|------------|---|-----------|-----------------|-----------|---|-----------|-------------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,442 | 0,445 \pm 0,004 | 1,0 | 1,041 \pm ^{0,069} _{0,041} | 0,902 | 0,902 | 0,043 | 0,039 \pm ^{0,004} _{0,005} | 0,016 | 0,017 \pm 0,001 |
| 0,449 | | 1,110 | | | | 0,039 | | 0,017 | |
| | | 1,013 | | | | 0,034 | | 0,018 | |
| | | | | | | 0,041 | | 0,019 | |

Tabelle 8.38: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 50,3 Mol% Acetaldehyd und 49,2 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Acetaldehyd

| Acetaldehyd | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|-------------------|------------|---|-----------|-----------------|-----------|---|-----------|---|
| A_A | \bar{A}_A | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | 1,002 \pm 0,002 | 0,985 | 1,019 \pm ^{0,051} _{0,034} | 1,276 | 1,276 | 0,071 | 0,075 \pm ^{0,005} _{0,003} | 0,032 | 0,033 \pm ^{0,006} _{0,003} |
| 1,004 | | 1,070 | | | | 0,080 | | 0,031 | |
| | | 1,002 | | | | 0,074 | | 0,038 | |
| | | | | | | 0,073 | | 0,029 | |

Tabelle 8.39: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 50,3 Mol% Acetaldehyd und 49,2 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Acetaldehyd | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|-------------|------------|---|-----------|-----------------|-----------|---|-----------|---|
| A_A | \bar{A}_A | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,019 | 1,019 | 1,0 | 1,035 \pm ^{0,053} _{0,035} | 1,312 | 1,312 | 0,076 | 0,077 \pm ^{0,004} _{0,003} | 0,033 | 0,034 \pm ^{0,005} _{0,002} |
| 1,019 | | 1,089 | | | | 0,081 | | 0,033 | |
| | | 1,018 | | | | 0,079 | | 0,039 | |
| | | | | | | 0,074 | | 0,032 | |

Tabelle 8.40: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 60,0 Mol% Acetaldehyd und 39,6 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Acetaldehyd

| Acetaldehyd | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|-------------------|------------|---|-----------|-----------------|-----------|---|-----------|-------------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | 1,021 \pm 0,021 | 0,403 | 0,418 \pm ^{0,034} _{0,019} | 0,713 | 0,713 | 0,063 | 0,057 \pm ^{0,006} _{0,004} | 0,024 | 0,024 \pm 0,002 |
| 1,042 | | 0,452 | | | | 0,056 | | 0,022 | |
| | | 0,399 | | | | 0,054 | | 0,023 | |
| | | | | | | 0,057 | | 0,026 | |

Tabelle 8.41: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 60,0 Mol% Acetaldehyd und 39,6 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Acetaldehyd | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|-------------------|------------|---|-----------|-----------------|-----------|---|-----------|---|
| A_A | \bar{A}_A | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 2,516 | 2,570 \pm 0,054 | 1,0 | 1,041 \pm ^{0,082} _{0,041} | 1,792 | 1,792 | 0,158 | 0,148 \pm ^{0,010} _{0,012} | 0,061 | 0,065 \pm ^{0,005} _{0,004} |
| 2,624 | | 1,124 | | | | 0,146 | | 0,061 | |
| | | 1,001 | | | | 0,136 | | 0,070 | |
| | | | | | | 0,153 | | 0,067 | |

Tabelle 8.42: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 80,3 Mol% Acetaldehyd und 19,5 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Acetaldehyd

| Acetaldehyd | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|-------------------|------------|-----------------------------|-----------|-----------------|-----------|-------------------|-----------|-------------------------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $1,033 \pm 0,033$ | 0,064 | $0,067 \pm_{0,003}^{0,002}$ | 0,185 | 0,185 | 0,020 | $0,021 \pm 0,001$ | 0,010 | $0,009 \pm_{0,0006}^{0,0004}$ |
| 1,065 | | 0,069 | | | | 0,021 | | 0,009 | |
| | | 0,068 | | | | 0,021 | | 0,009 | |
| | | | | | | 0,022 | | 0,010 | |

Tabelle 8.43: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 80,3 Mol% Acetaldehyd und 19,5 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Acetaldehyd | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|--------------------|------------|-----------------------------|-----------|-----------------|-----------|-------------------|-----------|-----------------------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 16,106 | $16,653 \pm 0,548$ | 1,0 | $1,047 \pm_{0,047}^{0,060}$ | 2,993 | 2,993 | 0,344 | $0,347 \pm 0,012$ | 0,168 | $0,160 \pm_{0,009}^{0,008}$ |
| 17,201 | | 1,107 | | | | 0,335 | | 0,151 | |
| | | 1,034 | | | | 0,359 | | 0,154 | |
| | | | | | | 0,351 | | 0,167 | |

273 K

Tabelle 8.44: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 42,0 Mol% Acetaldehyd und 57,4 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Acetaldehyd

| Acetaldehyd | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|-------------------|------------|----------------------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,971 \pm 0,029$ | 4,913 | $5,03 \pm_{0,117}^{0,225}$ | 6,983 | 6,983 | 0,336 | $0,335 \pm_{0,010}^{0,016}$ | 0,094 | $0,104 \pm_{0,010}^{0,007}$ |
| 0,942 | | 4,922 | | | | 0,326 | | 0,107 | |
| | | 5,255 | | | | 0,329 | | 0,111 | |
| | | | | | | 0,351 | | | |

Tabelle 8.45: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 42,0 Mol% Acetaldehyd und 57,4 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Acetaldehyd | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|-------------------|------------|-----------------------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------------------|-----------|-------------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,207 | $0,200 \pm 0,007$ | 1,0 | $1,034 \pm_{0,034}^{0,054}$ | 1,429 | 1,429 | 0,069 | $0,068 \pm_{0,003}^{0,002}$ | 0,018 | $0,022 \pm 0,004$ |
| 0,193 | | 1,015 | | | | 0,064 | | 0,022 | |
| | | 1,088 | | | | 0,067 | | 0,026 | |
| | | | | | | 0,070 | | | |

Tabelle 8.46: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 50,3 Mol% Acetaldehyd und 49,2 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Acetaldehyd

| Acetaldehyd | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|-------------------|------------|-----------------------------|-----------|-------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $1,038 \pm 0,038$ | 1,343 | $1,372 \pm^{0,072}_{0,043}$ | 3,296 | $3,393 \pm 0,097$ | 0,287 | $0,297 \pm^{0,017}_{0,010}$ | 0,099 | $0,104 \pm^{0,006}_{0,005}$ |
| 1,076 | | 1,329 | | 3,489 | | 0,290 | | 0,104 | |
| | | 1,445 | | | | 0,297 | | 0,110 | |
| | | | | | | 0,314 | | | |

Tabelle 8.47: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 50,3 Mol% Acetaldehyd und 49,2 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Acetaldehyd | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|-------------------|------------|-----------------------------|-----------|-------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,743 | $0,756 \pm 0,013$ | 1,0 | $1,028 \pm^{0,060}_{0,032}$ | 2,463 | $2,534 \pm 0,071$ | 0,215 | $0,223 \pm^{0,013}_{0,007}$ | 0,071 | $0,079 \pm^{0,010}_{0,008}$ |
| 0,768 | | 0,996 | | 2,605 | | 0,217 | | 0,078 | |
| | | 1,087 | | | | 0,223 | | 0,089 | |
| | | | | | | 0,236 | | | |

Tabelle 8.48: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 60,0 Mol% Acetaldehyd und 39,6 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Acetaldehyd

| Acetaldehyd | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|-------------------|------------|-----------------------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $1,009 \pm 0,009$ | 0,316 | $0,329 \pm^{0,015}_{0,012}$ | 1,379 | 1,379 | 0,221 | $0,207 \pm^{0,015}_{0,010}$ | 0,079 | $0,088 \pm^{0,016}_{0,009}$ |
| 1,018 | | 0,326 | | | | 0,212 | | 0,104 | |
| | | 0,343 | | | | 0,197 | | 0,090 | |
| | | | | | | 0,197 | | 0,079 | |

Tabelle 8.49: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 60,0 Mol% Acetaldehyd und 39,6 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Acetaldehyd | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|-------------|-------------------|------------|-----------------------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 3,195 | $3,227 \pm 0,032$ | 1,0 | $1,034 \pm^{0,053}_{0,034}$ | 4,442 | 4,442 | 0,712 | $0,657 \pm^{0,055}_{0,035}$ | 0,251 | $0,288 \pm^{0,046}_{0,037}$ |
| 3,258 | | 1,015 | | | | 0,661 | | 0,334 | |
| | | 1,087 | | | | 0,633 | | 0,313 | |
| | | | | | | 0,622 | | 0,255 | |

255 KTabelle 8.50: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 50,3 Mol% Acetaldehyd und 49,2 Mol% 1-Propanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Acetaldehyd

| Acetaldehyd | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|--------------|-------------------|-------------------------|-----------------------------|-----------|-----------------|----------------------------------|-----------------------------|-------------------------|-----------------------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 0,973 | $0,986 \pm 0,014$ | 1,779 1,769 1,830 | $1,793 \pm_{0,023}^{0,037}$ | 7,354 | 7,354 | 0,575 0,554 0,610 0,664 | $0,601 \pm_{0,047}^{0,063}$ | 0,262 0,274 0,264 | $0,267 \pm_{0,005}^{0,007}$ |

Tabelle 8.51: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 50,3 Mol% Acetaldehyd und 49,2 Mol% 1-Propanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Acetaldehyd | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------------|------------------|-----------------------|-----------------------------|-----------|-----------------|----------------------------------|-----------------------------|-------------------------|-----------------------------|
| A_A | \bar{A}_A | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,559 0,539 | $0,549 \pm 0,01$ | 1,0 0,992 1,030 | $1,007 \pm_{0,015}^{0,022}$ | 4,025 | 4,025 | 0,325 0,317 0,348 0,368 | $0,339 \pm_{0,022}^{0,028}$ | 0,143 0,135 0,147 | $0,141 \pm_{0,006}^{0,005}$ |

8.1.3.4 Propanal + Methanol**295 K**Tabelle 8.52: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 9,8 Mol% Propanal und 89,9 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Propanal

| Propanal | | Methanol | | HA 1 | | VA | |
|-----------------------|-----------------------------|----------|-------------|--------------------------------------|------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{VA} | \bar{A}_{VA} |
| 1,0 0,947 0,929 | $0,959 \pm_{0,030}^{0,041}$ | 145,376 | 145,376 | 13,358 13,552 14,839 14,165 | $13,979 \pm_{0,621}^{0,861}$ | 2,477 5,332 2,9032 2,850 | $2,712 \pm_{0,236}^{0,191}$ |

Tabelle 8.53: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 9,8 Mol% Propanal und 89,9 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Propanal | | Methanol | | HA 1 | | VA | |
|-------------------------|-------------------|----------|-------------|----------------------------------|-----------------------------|----------------------------------|-------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{VA} | \bar{A}_{VA} |
| 0,007 0,006 0,006 | $0,006 \pm 0,001$ | 1,0 | 1,0 | 0,092 0,095 0,102 0,097 | $0,096 \pm_{0,005}^{0,006}$ | 0,017 0,037 0,020 0,019 | $0,019 \pm 0,001$ |

Tabelle 8.54: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 24,0 Mol% Propanal und 75,3 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Propanal

| Propanal | | Methanol | | HA 1 | | VA | |
|----------|-----------------------------|----------|-------------|-----------|-----------------------------|----------|-----------------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{VA} | \bar{A}_{VA} |
| 1,0 | $0,968 \pm_{0,023}^{0,032}$ | 24,368 | 24,368 | 9,266 | $9,438 \pm_{0,474}^{0,520}$ | 0,272 | $0,333 \pm_{0,061}^{0,089}$ |
| 0,958 | | | | 8,964 | | 0,657 | |
| 0,945 | | | | 9,958 | | 0,315 | |
| | | | | 9,564 | | 0,422 | |

Tabelle 8.55: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 24,0 Mol% Propanal und 75,3 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Propanal | | Methanol | | HA 1 | | VA | |
|----------|-----------------------------|----------|-------------|-----------|-----------------------------|----------|-----------------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{VA} | \bar{A}_{VA} |
| 0,042 | $0,040 \pm_{0,001}^{0,002}$ | 1,0 | 1,0 | 0,382 | $0,390 \pm_{0,023}^{0,030}$ | 0,012 | $0,014 \pm_{0,002}^{0,005}$ |
| 0,040 | | | | 0,367 | | 0,026 | |
| 0,039 | | | | 0,421 | | 0,012 | |
| | | | | 0,391 | | 0,018 | |

Tabelle 8.56: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,9 Mol% Propanal und 49,6 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Propanal

| Propanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-----------------------------|----------|-------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,974 \pm_{0,030}^{0,026}$ | 1,222 | 1,222 | 2,236 | $2,300 \pm_{0,065}^{0,049}$ | 0,071 | $0,069 \pm_{0,005}^{0,003}$ | 0,035 | $0,032 \pm_{0,004}^{0,003}$ |
| 0,943 | | | | 2,316 | | 0,067 | | 0,034 | |
| 0,978 | | | | 2,349 | | 0,064 | | 0,034 | |
| | | | | | | 0,068 | | 0,028 | |
| | | | | | | 0,070 | | 0,029 | |
| | | | | | | 0,071 | | | |

Tabelle 8.57: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,9 Mol% Propanal und 49,6 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Propanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-----------------------------|----------|-------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,819 | $0,795 \pm_{0,027}^{0,024}$ | 1,0 | 1,0 | 1,830 | $1,887 \pm_{0,057}^{0,048}$ | 0,056 | $0,054 \pm_{0,005}^{0,002}$ | 0,025 | $0,025 \pm_{0,002}^{0,003}$ |
| 0,768 | | | | 1,896 | | 0,053 | | 0,025 | |
| 0,799 | | | | 1,935 | | 0,050 | | 0,028 | |
| | | | | | | 0,057 | | 0,023 | |
| | | | | | | 0,057 | | 0,025 | |
| | | | | | | 0,054 | | | |

Tabelle 8.58: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 72,3 Mol% Propanal und 25,5 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Propanal

| Propanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|--|----------|-------------|-----------|--|-----------|--|-----------|-----------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,981 \pm \begin{smallmatrix} 0,019 \\ 0,013 \end{smallmatrix}$ | 0,081 | 0,081 | 0,375 | $0,394 \pm \begin{smallmatrix} 0,028 \\ 0,029 \end{smallmatrix}$ | 0,029 | $0,029 \pm \begin{smallmatrix} 0,002 \\ 0,003 \end{smallmatrix}$ | 0,014 | 0,014 |
| 0,968 | | | | 0,422 | | 0,029 | | 0,014 | |
| 0,974 | | | | 0,385 | | 0,026 | | 0,014 | |
| | | | | | | 0,031 | | 0,014 | |

Tabelle 8.59: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 72,3 Mol% Propanal und 25,5 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Propanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|---|----------|-------------|-----------|--|-----------|--|-----------|--|
| A_P | \bar{A}_P | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 12,403 | $12,175 \pm \begin{smallmatrix} 0,228 \\ 0,149 \end{smallmatrix}$ | 1,0 | 1,0 | 4,641 | $4,894 \pm \begin{smallmatrix} 0,366 \\ 0,253 \end{smallmatrix}$ | 0,360 | $0,363 \pm \begin{smallmatrix} 0,053 \\ 0,048 \end{smallmatrix}$ | 0,173 | $0,177 \pm \begin{smallmatrix} 0,007 \\ 0,008 \end{smallmatrix}$ |
| 12,026 | | | | 5,260 | | 0,360 | | 0,169 | |
| 12,096 | | | | 4,780 | | 0,315 | | 0,181 | |
| | | | | | | 0,416 | | 0,184 | |

Tabelle 8.60: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 87,1 Mol% Propanal und 10,2 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Propanal

| Propanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|--|----------|-------------|-----------|--|-----------|-------------------|-----------|-------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $1,048 \pm \begin{smallmatrix} 0,026 \\ 0,048 \end{smallmatrix}$ | 0,015 | 0,015 | 0,100 | $0,105 \pm \begin{smallmatrix} 0,006 \\ 0,005 \end{smallmatrix}$ | 0,010 | 0,011 \pm 0,001 | 0,005 | 0,005 \pm 0,001 |
| 1,075 | | | | 0,110 | | 0,012 | | 0,006 | |
| 1,071 | | | | 0,104 | | 0,009 | | 0,004 | |
| | | | | | | 0,011 | | 0,006 | |

Tabelle 8.61: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 87,1 Mol% Propanal und 10,2 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Propanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|--|----------|-------------|-----------|--|-----------|--|-----------|--|
| A_P | \bar{A}_P | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 68,137 | $71,93 \pm \begin{smallmatrix} 2,04 \\ 3,79 \end{smallmatrix}$ | 1,0 | 1,0 | 6,949 | $7,180 \pm \begin{smallmatrix} 0,403 \\ 0,231 \end{smallmatrix}$ | 0,725 | $0,734 \pm \begin{smallmatrix} 0,074 \\ 0,071 \end{smallmatrix}$ | 0,358 | $0,366 \pm \begin{smallmatrix} 0,053 \\ 0,074 \end{smallmatrix}$ |
| 73,970 | | | | 7,583 | | 0,807 | | 0,418 | |
| 73,686 | | | | 7,007 | | 0,662 | | 0,292 | |
| | | | | | | 0,740 | | 0,394 | |

273 KTabelle 8.62: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 39,4 Mol% Propanal und 59,4 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Propanal

| Propanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-----------------------------|----------|-------------|-----------|--------------------|-----------|-------------------|-----------|-----------------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,980 \pm_{0,013}^{0,020}$ | 9,008 | 9,008 | 13,498 | $13,763 \pm 0,265$ | 0,240 | $0,231 \pm 0,022$ | 0,108 | $0,114 \pm_{0,008}^{0,014}$ |
| 0,967 | | | | 14,029 | | 0,222 | | 0,127 | |
| 0,974 | | | | | | 0,252 | | 0,106 | |
| | | | | | | 0,209 | | | |

Tabelle 8.63: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 39,4 Mol% Propanal und 59,4 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Propanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-----------------------------|----------|-------------|-----------|-------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,110 | $0,107 \pm_{0,003}^{0,001}$ | 1,0 | 1,0 | 1,511 | $1,549 \pm 0,038$ | 0,027 | $0,026 \pm_{0,002}^{0,003}$ | 0,010 | $0,012 \pm 0,002$ |
| 0,105 | | | | 1,586 | | 0,024 | | 0,014 | |
| 0,106 | | | | | | 0,029 | | 0,012 | |
| | | | | | | 0,023 | | | |

Tabelle 8.64: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,5 Mol% Propanal und 50,0 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Propanal

| Propanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-----------------------------|----------|-------------|-----------|-------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $1,052 \pm_{0,052}^{0,039}$ | 1,622 | 1,622 | 5,946 | $6,020 \pm 0,074$ | 0,202 | $0,228 \pm_{0,026}^{0,020}$ | 0,143 | $0,126 \pm_{0,015}^{0,017}$ |
| 1,064 | | | | 6,094 | | 0,234 | | 0,118 | |
| 1,091 | | | | | | 0,209 | | 0,141 | |
| | | | | | | 0,247 | | 0,117 | |
| | | | | | | 0,246 | | 0,111 | |

Tabelle 8.65: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,5 Mol% Propanal und 50,0 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Propanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-----------------------------|----------|-------------|-----------|-------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,624 | $0,651 \pm_{0,028}^{0,030}$ | 1,0 | 1,0 | 3,612 | $3,664 \pm 0,052$ | 0,123 | $0,141 \pm_{0,018}^{0,016}$ | 0,087 | $0,073 \pm_{0,012}^{0,014}$ |
| 0,649 | | | | 3,715 | | 0,144 | | 0,061 | |
| 0,681 | | | | | | 0,128 | | 0,084 | |
| | | | | | | 0,157 | | 0,064 | |
| | | | | | | 0,155 | | 0,068 | |

Tabelle 8.66: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 59,8 Mol% Propanal und 38,3 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Propanal

| Propanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-----------------------------|----------|-------------|-----------|-------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,977 \pm_{0,028}^{0,023}$ | 0,153 | 0,153 | 1,495 | $1,540 \pm 0,046$ | 0,142 | $0,143 \pm_{0,001}^{0,002}$ | 0,063 | $0,060 \pm 0,004$ |
| 0,949 | | | | 1,586 | | 0,144 | | 0,056 | |
| 0,981 | | | | | | 0,143 | | 0,064 | |
| | | | | | | 0,145 | | 0,057 | |

Tabelle 8.67: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 59,8 Mol% Propanal und 38,3 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Propanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-----------------------------|----------|-------------|-----------|--------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 6,553 | $6,395 \pm_{0,168}^{0,159}$ | 1,0 | 1,0 | 9,804 | $10,119 \pm 0,315$ | 0,913 | $0,921 \pm_{0,008}^{0,017}$ | 0,415 | $0,402 \pm_{0,024}^{0,018}$ |
| 6,226 | | | | 10,434 | | 0,915 | | 0,396 | |
| 6,404 | | | | | | 0,918 | | 0,420 | |
| | | | | | | 0,938 | | 0,378 | |

255 K

Tabelle 8.68: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,5 Mol% Propanal und 50,0 Mol% Methanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Propanal

| Propanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-----------------------------|----------|-------------|-----------|--------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,997 \pm_{0,014}^{0,011}$ | 1,868 | 1,868 | 10,226 | $10,371 \pm 0,146$ | 0,314 | $0,295 \pm_{0,024}^{0,019}$ | 0,137 | $0,139 \pm_{0,025}^{0,019}$ |
| 0,983 | | | | 10,517 | | 0,271 | | 0,148 | |
| 1,008 | | | | | | 0,289 | | 0,159 | |
| | | | | | | 0,307 | | 0,114 | |

Tabelle 8.69: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,5 Mol% Propanal und 50,0 Mol% Methanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Propanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-----------------------------|----------|-------------|-----------|-------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,540 | $0,536 \pm_{0,021}^{0,016}$ | 1,0 | 1,0 | 5,572 | $5,627 \pm 0,055$ | 0,170 | $0,156 \pm_{0,010}^{0,014}$ | 0,078 | $0,078 \pm_{0,016}^{0,011}$ |
| 0,515 | | | | 5,682 | | 0,147 | | 0,082 | |
| 0,552 | | | | | | 0,150 | | 0,089 | |
| | | | | | | 0,159 | | 0,062 | |

8.1.3.5 Propanal + Ethanol

295 K

Tabelle 8.70: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 10,0 Mol% Propanal und 87,9 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Propanal

| Propanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|----------|-----------------------------|---------|--------------------|-------|-----------------------------|
| 1,0 | $0,984 \pm_{0,027}^{0,016}$ | 38,425 | $38,599 \pm 0,175$ | 5,264 | $5,468 \pm_{0,203}^{0,146}$ |
| 0,958 | | 38,774 | | 5,510 | |
| 0,995 | | | | 5,614 | |
| | | | | 5,336 | |
| | | | | 5,614 | |

Tabelle 8.71: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 10,0 Mol% Propanal und 87,9 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Propanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|----------|-------------------|---------|-------------------|-----------|-----------------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,027 | $0,026 \pm 0,001$ | 1,0 | $1,005 \pm 0,005$ | 0,137 | $0,144 \pm_{0,007}^{0,005}$ |
| 0,025 | | 1,009 | | 0,142 | |
| 0,027 | | | | 0,150 | |
| | | | | 0,144 | |
| | | | | 0,149 | |

Tabelle 8.72: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 23,0 Mol% Propanal und 74,8 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Propanal

| Propanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|----------|-----------------------------|---------|--------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,0 | $0,952 \pm_{0,058}^{0,049}$ | 10,837 | $10,633 \pm 0,204$ | 3,735 | $3,688 \pm_{0,096}^{0,091}$ | 0,046 | $0,045 \pm_{0,013}^{0,011}$ |
| 0,961 | | 10,429 | | 3,683 | | 0,056 | |
| 0,893 | | | | 3,779 | | 0,032 | |
| | | | | 3,592 | | | |
| | | | | 3,652 | | | |

Tabelle 8.73: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 23,0 Mol% Propanal und 74,8 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Propanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|----------|-----------------------------|---------|-------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 0,094 | $0,090 \pm_{0,007}^{0,004}$ | 1,0 | $0,991 \pm 0,009$ | 0,350 | $0,343 \pm_{0,011}^{0,010}$ | 0,004 | $0,004 \pm 0,001$ |
| 0,093 | | 0,982 | | 0,340 | | 0,005 | |
| 0,083 | | | | 0,353 | | 0,004 | |
| | | | | 0,332 | | | |
| | | | | 0,340 | | | |

Tabelle 8.74: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 47,3 Mol% Propanal und 50,2 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Propanal

| Propanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-----------------------------|---------|---------------------|-----------|-----------------------------|-----------|---------------------|-----------|-----------------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,963 \pm_{0,027}^{0,037}$ | 1,082 | $1,066 \pm_{0,016}$ | 1,192 | $1,208 \pm_{0,045}^{0,032}$ | 0,047 | $0,048 \pm_{0,001}$ | 0,027 | $0,027 \pm_{0,002}^{0,001}$ |
| 0,953 | | 1,050 | | 1,237 | | 0,049 | | 0,028 | |
| 0,937 | | | | 1,162 | | 0,048 | | 0,027 | |
| | | | | 1,240 | | 0,049 | | 0,025 | |

Tabelle 8.75: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 47,3 Mol% Propanal und 50,2 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Propanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-----------------------------|---------|---------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|---------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,926 | $0,886 \pm_{0,036}^{0,040}$ | 1,0 | $0,988 \pm_{0,012}$ | 1,113 | $1,120 \pm_{0,039}^{0,028}$ | 0,047 | $0,047 \pm_{0,001}^{0,002}$ | 0,024 | $0,024 \pm_{0,002}$ |
| 0,883 | | 0,976 | | 1,137 | | 0,049 | | 0,026 | |
| 0,850 | | | | 1,081 | | 0,047 | | 0,024 | |
| | | | | 1,148 | | 0,046 | | 0,023 | |

Tabelle 8.76: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 75,6 Mol% Propanal und 21,7 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Propanal

| Propanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-----------------------------|---------|---------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|---------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $1,017 \pm_{0,017}^{0,012}$ | 0,100 | $0,099 \pm_{0,001}$ | 0,242 | $0,240 \pm_{0,014}^{0,012}$ | 0,022 | $0,022 \pm_{0,002}^{0,003}$ | 0,011 | $0,010 \pm_{0,001}$ |
| 1,029 | | 0,098 | | 0,251 | | 0,022 | | 0,010 | |
| 1,022 | | | | 0,226 | | 0,020 | | 0,010 | |
| | | | | | | 0,021 | | 0,011 | |

Tabelle 8.77: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 75,6 Mol% Propanal und 21,7 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Propanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|------------------------------|---------|---------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 10,057 | $10,232 \pm_{0,175}^{0,124}$ | 1,0 | $0,990 \pm_{0,010}$ | 2,439 | $2,436 \pm_{0,120}^{0,117}$ | 0,215 | $0,211 \pm_{0,021}^{0,006}$ | 0,111 | $0,107 \pm_{0,005}^{0,006}$ |
| 10,357 | | 0,980 | | 2,553 | | 0,217 | | 0,103 | |
| 10,283 | | | | 2,316 | | 0,190 | | 0,103 | |
| | | | | | | 0,209 | | 0,113 | |

Tabelle 8.78: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 86,3 Mol% Propanal und 10,8 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Propanal

| Propanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|--------------------------------|---------|-------------|-----------|--------------------------------|-----------|-------------------|-----------|-------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $1,060 \pm {}^{0,044}_{0,060}$ | 0,030 | 0,030 | 0,095 | $0,100 \pm {}^{0,005}_{0,004}$ | 0,009 | $0,010 \pm 0,001$ | 0,004 | $0,006 \pm 0,001$ |
| 1,104 | | 0,030 | | 0,105 | | 0,011 | | 0,006 | |
| 1,076 | | | | 0,098 | | 0,009 | | 0,006 | |
| | | | | | | 0,011 | | 0,006 | |

Tabelle 8.79: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 86,3 Mol% Propanal und 10,8 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Propanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-------------------------------|---------|-------------------|-----------|--------------------------------|-----------|--------------------------------|-----------|--------------------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 32,651 | $34,648 \pm {}^{1,52}_{1,98}$ | 1,0 | $1,015 \pm 0,015$ | 3,078 | $3,218 \pm {}^{0,148}_{0,140}$ | 0,305 | $0,329 \pm {}^{0,032}_{0,024}$ | 0,142 | $0,179 \pm {}^{0,021}_{0,037}$ |
| 36,166 | | 1,030 | | 3,366 | | 0,361 | | 0,174 | |
| 35,127 | | | | 3,210 | | 0,306 | | 0,200 | |
| | | | | | | 0,343 | | 0,200 | |

273 KTabelle 8.80: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 38,8 Mol% Propanal und 58,8 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Propanal

| Propanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|--------------------------------|---------|------------------|-----------|-------------------------------|-----------|--------------------------------|-----------|-------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,975 \pm {}^{0,026}_{0,051}$ | 4,182 | $4,21 \pm 0,032$ | 5,603 | $5,69 \pm {}^{0,117}_{0,092}$ | 0,196 | $0,185 \pm {}^{0,011}_{0,010}$ | 0,095 | $0,095 \pm 0,001$ |
| 0,924 | | 4,245 | | 5,595 | | 0,189 | | 0,094 | |
| 1,002 | | | | 5,864 | | 0,183 | | 0,095 | |
| | | | | | | 0,175 | | 0,095 | |
| | | | | | | 0,182 | | | |

Tabelle 8.81: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 38,8 Mol% Propanal und 58,8 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Propanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|--------------------------------|---------|-------------------|-----------|-------------------------------|-----------|--------------------------------|-----------|-------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,240 | $0,233 \pm {}^{0,007}_{0,015}$ | 1,0 | $1,008 \pm 0,008$ | 1,338 | $1,35 \pm {}^{0,031}_{0,017}$ | 0,046 | $0,044 \pm {}^{0,003}_{0,002}$ | 0,023 | $0,023 \pm 0,001$ |
| 0,218 | | 1,015 | | 1,335 | | 0,046 | | 0,023 | |
| 0,240 | | | | 1,382 | | 0,044 | | 0,022 | |
| | | | | | | 0,041 | | 0,023 | |
| | | | | | | 0,041 | | | |

Tabelle 8.82: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,5 Mol% Propanal und 48,0 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Propanal

| Propanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|----------------------------|---------|----------------------------|-----------|----------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $1,05 \pm_{0,050}^{0,033}$ | 1,211 | $1,25 \pm_{0,040}^{0,033}$ | 3,008 | $3,08 \pm_{0,071}^{0,071}$ | 0,189 | $0,181 \pm_{0,007}^{0,008}$ | 0,070 | $0,077 \pm_{0,007}^{0,013}$ |
| 1,068 | | 1,290 | | 3,151 | | 0,177 | | 0,071 | |
| 1,083 | | | | | | 0,174 | | 0,090 | |
| | | | | | | 0,184 | | | |

Tabelle 8.83: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,5 Mol% Propanal und 48,0 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Propanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-----------------------------|---------|----------------------------|-----------|----------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,822 | $0,872 \pm_{0,051}^{0,029}$ | 1,0 | $1,03 \pm_{0,034}^{0,034}$ | 2,505 | $2,56 \pm_{0,056}^{0,056}$ | 0,157 | $0,151 \pm_{0,005}^{0,006}$ | 0,057 | $0,061 \pm_{0,004}^{0,009}$ |
| 0,894 | | 1,068 | | 2,618 | | 0,149 | | 0,057 | |
| 0,902 | | | | | | 0,147 | | 0,070 | |
| | | | | | | 0,153 | | | |

Tabelle 8.84: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,2 Mol% Propanal und 39,2 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Propanal

| Propanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|----------------------------|---------|-----------------------------|-----------|----------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $1,03 \pm_{0,034}^{0,043}$ | 0,361 | $0,367 \pm_{0,006}^{0,006}$ | 1,397 | $1,43 \pm_{0,031}^{0,031}$ | 0,128 | $0,126 \pm_{0,004}^{0,003}$ | 0,063 | $0,063 \pm_{0,001}^{0,001}$ |
| 1,026 | | 0,373 | | 1,458 | | 0,126 | | 0,061 | |
| 1,077 | | | | | | 0,122 | | 0,064 | |
| | | | | | | 0,128 | | | |

Tabelle 8.85: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,2 Mol% Propanal und 39,2 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Propanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|----------------------------|---------|----------------------------|-----------|----------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 2,714 | $2,83 \pm_{0,112}^{0,138}$ | 1,0 | $1,02 \pm_{0,015}^{0,015}$ | 3,853 | $3,92 \pm_{0,064}^{0,064}$ | 0,353 | $0,347 \pm_{0,013}^{0,010}$ | 0,168 | $0,170 \pm_{0,003}^{0,005}$ |
| 2,799 | | 1,029 | | 3,981 | | 0,344 | | 0,167 | |
| 2,964 | | | | | | 0,334 | | 0,175 | |
| | | | | | | 0,357 | | | |

255 KTabelle 8.86: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,5 Mol% Propanal und 48,0 Mol% Ethanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Propanal

| Propanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-----------------------------|---------|----------------------------|-----------|----------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,970 \pm_{0,022}^{0,030}$ | 1,261 | $1,27 \pm_{0,003}^{0,003}$ | 4,787 | $4,91 \pm_{0,121}^{0,121}$ | 0,229 | $0,238 \pm_{0,023}^{0,027}$ | 0,131 | $0,133 \pm_{0,007}^{0,006}$ |
| 0,947 | | 1,268 | | 5,029 | | 0,215 | | 0,129 | |
| 0,962 | | | | | | 0,255 | | 0,139 | |
| | | | | | | 0,228 | | 0,127 | |
| | | | | | | 0,265 | | 0,139 | |

Tabelle 8.87: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,5 Mol% Propanal und 48,0 Mol% Ethanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Propanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-----------------------------|---------|----------------------------|-----------|----------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,809 | $0,788 \pm_{0,016}^{0,020}$ | 1,0 | $1,02 \pm_{0,017}^{0,017}$ | 3,936 | $4,02 \pm_{0,080}^{0,080}$ | 0,181 | $0,194 \pm_{0,024}^{0,033}$ | 0,105 | $0,106 \pm_{0,015}^{0,016}$ |
| 0,772 | | 1,035 | | 4,097 | | 0,170 | | 0,092 | |
| 0,783 | | | | | | 0,207 | | 0,114 | |
| | | | | | | 0,187 | | 0,098 | |
| | | | | | | 0,227 | | 0,122 | |

8.1.3.6 Propanal + 1-Propanol**295 K**Tabelle 8.88: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 9,7 Mol% Propanal und 89,1 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Propanal

| Propanal | | 1-Propanol | | HA 1 | |
|----------|-----------------------------|------------|----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $0,978 \pm_{0,025}^{0,022}$ | 48,430 | $48,845 \pm_{0,72}^{1,14}$ | 6,200 | $6,317 \pm_{0,154}^{0,144}$ |
| 0,981 | | 48,124 | | 6,163 | |
| 0,952 | | 49,982 | | 6,317 | |
| | | | | 6,322 | |
| | | | | 6,461 | |
| | | | | 6,441 | |

Tabelle 8.89: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 9,7 Mol% Propanal und 89,1 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Propanal | | 1-Propanol | | HA 1 | |
|----------|-------------|------------|--|-----------|--|
| A_P | \bar{A}_P | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,020 | 0,020 | 1,0 | $1,010 \pm \begin{smallmatrix} 0,027 \\ 0,016 \end{smallmatrix}$ | 0,127 | $0,130 \pm \begin{smallmatrix} 0,005 \\ 0,004 \end{smallmatrix}$ |
| 0,020 | | 0,994 | | 0,126 | |
| 0,020 | | 1,037 | | 0,131 | |
| | | | | 0,130 | |
| | | | | 0,136 | |
| | | | | 0,131 | |

Tabelle 8.90: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 23,9 Mol% Propanal und 74,6 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Propanal

| Propanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|----------|--|------------|---|-----------|---|-----------|--|
| A_P | \bar{A}_P | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,0 | $0,974 \pm \begin{smallmatrix} 0,026 \\ 0,020 \end{smallmatrix}$ | 8,622 | $8,76 \pm \begin{smallmatrix} 0,206 \\ 0,137 \end{smallmatrix}$ | 3,366 | $3,49 \pm \begin{smallmatrix} 0,190 \\ 0,123 \end{smallmatrix}$ | 0,053 | $0,050 \pm \begin{smallmatrix} 0,003 \\ 0,004 \end{smallmatrix}$ |
| 0,968 | | 8,690 | | 3,450 | | 0,046 | |
| 0,955 | | 8,966 | | 3,463 | | 0,050 | |
| | | | | 3,680 | | | |

Tabelle 8.91: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 23,9 Mol% Propanal und 74,6 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Propanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|----------|-------------------|------------|--|-----------|--|-----------|-------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 0,115 | $0,112 \pm 0,003$ | 1,0 | $1,021 \pm \begin{smallmatrix} 0,034 \\ 0,021 \end{smallmatrix}$ | 0,389 | $0,401 \pm \begin{smallmatrix} 0,021 \\ 0,012 \end{smallmatrix}$ | 0,006 | $0,006 \pm 0,001$ |
| 0,112 | | 1,007 | | 0,398 | | 0,005 | |
| 0,109 | | 1,055 | | 0,400 | | 0,006 | |
| | | | | 0,395 | | | |
| | | | | 0,421 | | | |

Tabelle 8.92: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,1 Mol% Propanal und 48,9 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Propanal

| Propanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|--|------------|--|-----------|--|-----------|-------------------|-----------|--|
| A_P | \bar{A}_P | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,993 \pm \begin{smallmatrix} 0,015 \\ 0,021 \end{smallmatrix}$ | 1,222 | $1,236 \pm \begin{smallmatrix} 0,011 \\ 0,013 \end{smallmatrix}$ | 1,281 | $1,294 \pm \begin{smallmatrix} 0,020 \\ 0,013 \end{smallmatrix}$ | 0,045 | $0,047 \pm 0,003$ | 0,021 | $0,024 \pm \begin{smallmatrix} 0,004 \\ 0,003 \end{smallmatrix}$ |
| 0,972 | | 1,238 | | 1,313 | | 0,044 | | 0,022 | |
| 1,008 | | 1,247 | | 1,287 | | 0,049 | | 0,024 | |
| | | | | | | 0,050 | | 0,025 | |
| | | | | | | 0,046 | | 0,028 | |

Tabelle 8.93: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,1 Mol% Propanal und 48,9 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Propanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-----------------------------|------------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-------------------|-----------|-------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,816 | $0,811 \pm_{0,018}^{0,014}$ | 1,0 | $1,018 \pm_{0,018}^{0,012}$ | 1,043 | $1,073 \pm_{0,030}^{0,031}$ | 0,037 | $0,040 \pm 0,003$ | 0,018 | $0,020 \pm 0,002$ |
| 0,793 | | 1,024 | | 1,103 | | 0,037 | | 0,020 | |
| 0,825 | | 1,031 | | 1,071 | | 0,040 | | 0,020 | |
| | | | | | | 0,041 | | 0,020 | |
| | | | | | | 0,043 | | 0,023 | |

Tabelle 8.94: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 72,5 Mol% Propanal und 25,0 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Propanal

| Propanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-----------------------------|------------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,994 \pm_{0,003}^{0,006}$ | 0,147 | $0,151 \pm_{0,003}^{0,004}$ | 0,309 | $0,327 \pm_{0,018}^{0,015}$ | 0,027 | $0,025 \pm_{0,003}^{0,001}$ | 0,013 | $0,013 \pm 0,002$ |
| 0,991 | | 0,155 | | 0,342 | | 0,022 | | 0,012 | |
| 0,991 | | 0,150 | | 0,331 | | 0,025 | | 0,015 | |
| | | | | | | 0,026 | | 0,013 | |
| | | | | | | 0,027 | | 0,013 | |

Tabelle 8.95: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 72,5 Mol% Propanal und 25,0 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Propanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|----------------------------|------------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 6,841 | $6,78 \pm_{0,032}^{0,062}$ | 1,0 | $1,032 \pm_{0,032}^{0,042}$ | 2,115 | $2,237 \pm_{0,122}^{0,098}$ | 0,165 | $0,166 \pm_{0,009}^{0,006}$ | 0,093 | $0,093 \pm_{0,012}^{0,007}$ |
| 6,749 | | 1,074 | | 2,335 | | 0,157 | | 0,081 | |
| 6,747 | | 1,022 | | 2,261 | | 0,169 | | 0,100 | |
| | | | | | | 0,168 | | 0,099 | |
| | | | | | | 0,172 | | | |

Tabelle 8.96: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 86,6 Mol% Propanal und 10,6 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Propanal

| Propanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-----------------------------|------------|-----------------------------|-----------|-------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $1,043 \pm_{0,043}^{0,034}$ | 0,030 | $0,032 \pm_{0,002}^{0,003}$ | 0,090 | $0,098 \pm 0,008$ | 0,010 | $0,010 \pm_{0,002}^{0,001}$ | 0,005 | $0,005 \pm 0,001$ |
| 1,077 | | 0,035 | | 0,106 | | 0,010 | | 0,005 | |
| 1,053 | | 0,031 | | 0,098 | | 0,008 | | 0,006 | |
| | | | | | | 0,011 | | | |

Tabelle 8.97: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 86,6 Mol% Propanal und 10,6 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Propanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|--|------------|--|-----------|---|-----------|--|-----------|--|
| A_P | \bar{A}_P | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 33,261 | $34,79 \pm \begin{smallmatrix} 1,48 \\ 1,52 \end{smallmatrix}$ | 1,0 | $1,052 \pm \begin{smallmatrix} 0,072 \\ 0,052 \end{smallmatrix}$ | 2,984 | $3,28 \pm \begin{smallmatrix} 0,28 \\ 0,29 \end{smallmatrix}$ | 0,331 | $0,306 \pm \begin{smallmatrix} 0,029 \\ 0,051 \end{smallmatrix}$ | 0,180 | $0,174 \pm \begin{smallmatrix} 0,009 \\ 0,015 \end{smallmatrix}$ |
| 36,263 | | 1,124 | | 3,556 | | 0,335 | | 0,159 | |
| 34,831 | | 1,031 | | 3,284 | | 0,255 | | 0,183 | |
| | | | | | | 0,304 | | | |

273 K

Tabelle 8.98: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 38,6 Mol% Propanal und 59,6 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Propanal

| Propanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|--|------------|---|-----------|------------------|-----------|--|-----------|--|
| A_P | \bar{A}_P | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,993 \pm \begin{smallmatrix} 0,040 \\ 0,047 \end{smallmatrix}$ | 5,686 | $5,80 \pm \begin{smallmatrix} 0,20 \\ 0,11 \end{smallmatrix}$ | 6,699 | $6,69 \pm 0,009$ | 0,189 | $0,191 \pm \begin{smallmatrix} 0,020 \\ 0,022 \end{smallmatrix}$ | 0,065 | $0,067 \pm \begin{smallmatrix} 0,018 \\ 0,012 \end{smallmatrix}$ |
| 0,945 | | 5,709 | | 6,682 | | 0,170 | | 0,064 | |
| 1,032 | | 6,001 | | | | 0,187 | | 0,055 | |
| | | | | | | 0,200 | | 0,085 | |
| | | | | | | 0,211 | | | |

Tabelle 8.99: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 38,6 Mol% Propanal und 59,6 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Propanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|--|------------|--|-----------|-------------------|-----------|--|-----------|-------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,177 | $0,175 \pm \begin{smallmatrix} 0,005 \\ 0,007 \end{smallmatrix}$ | 1,0 | $1,028 \pm \begin{smallmatrix} 0,050 \\ 0,028 \end{smallmatrix}$ | 1,192 | $1,192 \pm 0,001$ | 0,033 | $0,034 \pm \begin{smallmatrix} 0,004 \\ 0,005 \end{smallmatrix}$ | 0,013 | $0,011 \pm 0,004$ |
| 0,168 | | 1,006 | | 1,191 | | 0,029 | | 0,011 | |
| 0,180 | | 1,079 | | | | 0,033 | | 0,007 | |
| | | | | | | 0,038 | | 0,015 | |
| | | | | | | 0,036 | | | |

Tabelle 8.100: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,1 Mol% Propanal und 49,9 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Propanal

| Propanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|--|------------|--|-----------|-------------------|-----------|--|-----------|--|
| A_P | \bar{A}_P | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,975 \pm \begin{smallmatrix} 0,025 \\ 0,043 \end{smallmatrix}$ | 1,549 | $1,592 \pm \begin{smallmatrix} 0,068 \\ 0,042 \end{smallmatrix}$ | 3,441 | $3,452 \pm 0,012$ | 0,219 | $0,216 \pm \begin{smallmatrix} 0,024 \\ 0,021 \end{smallmatrix}$ | 0,094 | $0,092 \pm \begin{smallmatrix} 0,009 \\ 0,007 \end{smallmatrix}$ |
| 0,932 | | 1,565 | | 3,464 | | 0,203 | | 0,085 | |
| 0,992 | | 1,660 | | | | 0,195 | | 0,086 | |
| | | | | | | 0,240 | | 0,101 | |
| | | | | | | 0,223 | | 0,095 | |

Tabelle 8.101: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,1 Mol% Propanal und 49,9 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Propanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-----------------------------|------------|-----------------------------|-----------|-------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,650 | $0,632 \pm_{0,032}^{0,017}$ | 1,0 | $1,034 \pm_{0,034}^{0,048}$ | 2,216 | $2,223 \pm 0,007$ | 0,144 | $0,014 \pm_{0,015}^{0,014}$ | 0,057 | $0,058 \pm_{0,006}^{0,009}$ |
| 0,600 | | 1,020 | | 2,230 | | 0,134 | | 0,052 | |
| 0,647 | | 1,082 | | | | 0,126 | | 0,053 | |
| | | | | | | 0,154 | | 0,067 | |
| | | | | | | 0,145 | | 0,061 | |

Tabelle 8.102: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,3 Mol% Propanal und 39,5 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Propanal

| Propanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-----------------------------|------------|-----------------------------|-----------|-------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,976 \pm_{0,016}^{0,024}$ | 0,363 | $0,377 \pm_{0,014}^{0,010}$ | 1,336 | $1,383 \pm 0,047$ | 0,152 | $0,150 \pm_{0,011}^{0,012}$ | 0,048 | $0,059 \pm_{0,011}^{0,006}$ |
| 0,960 | | 0,381 | | 1,430 | | 0,139 | | 0,058 | |
| 0,968 | | 0,387 | | | | 0,146 | | 0,064 | |
| | | | | | | 0,151 | | 0,065 | |
| | | | | | | 0,162 | | | |

Tabelle 8.103: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,3 Mol% Propanal und 39,5 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Propanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-----------------------------|------------|-----------------------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_P | \bar{A}_P | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 2,748 | $2,686 \pm_{0,039}^{0,062}$ | 1,0 | $1,040 \pm_{0,040}^{0,026}$ | 3,682 | 3,682 | 0,421 | $0,413 \pm_{0,030}^{0,032}$ | 0,134 | $0,163 \pm_{0,029}^{0,017}$ |
| 2,647 | | 1,054 | | | | 0,383 | | 0,161 | |
| 2,663 | | 1,066 | | | | 0,400 | | 0,177 | |
| | | | | | | 0,416 | | 0,180 | |
| | | | | | | 0,445 | | | |

8.1.3.7 Butanal + Methanol

295 K

Tabelle 8.104: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 39,7 Mol% Butanal und 59,9 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Butanal

| Butanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|-----------------------------|----------|-------------|-----------|--------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,972 \pm_{0,037}^{0,028}$ | 2,91 | 2,91 | 3,10 | $3,16 \pm_{0,06}^{0,03}$ | 0,062 | $0,056 \pm_{0,004}^{0,007}$ | 0,031 | $0,038 \pm_{0,012}^{0,020}$ |
| 0,935 | | | | 3,18 | | 0,056 | | 0,058 | |
| 0,992 | | | | 3,17 | | 0,052 | | 0,026 | |
| 0,962 | | | | 3,19 | | 0,052 | | | |

Tabelle 8.105: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 39,7 Mol% Butanal und 59,9 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Butanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|--|----------|-------------|-----------|---|-----------|--|-----------|--|
| A_B | \bar{A}_B | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,344 | $0,334 \pm \begin{smallmatrix} 0,010 \\ 0,014 \end{smallmatrix}$ | 1,0 | 1,0 | 1,07 | $1,08 \pm \begin{smallmatrix} 0,011 \\ 0,014 \end{smallmatrix}$ | 0,021 | $0,019 \pm \begin{smallmatrix} 0,002 \\ 0,001 \end{smallmatrix}$ | 0,011 | $0,014 \pm \begin{smallmatrix} 0,009 \\ 0,005 \end{smallmatrix}$ |
| 0,32 | | | | 1,095 | | 0,019 | | 0,023 | |
| 0,341 | | | | 1,09 | | 0,018 | | 0,009 | |
| 0,33 | | | | 1,08 | | 0,018 | | | |

Tabelle 8.106: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,6 Mol% Butanal und 49,9 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Butanal

| Butanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|--|----------|-------------|-----------|-----------------|-----------|--|-----------|-------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,977 \pm \begin{smallmatrix} 0,023 \\ 0,034 \end{smallmatrix}$ | 1,082 | 1,082 | 1,834 | $1,87 \pm 0,04$ | 0,056 | $0,054 \pm \begin{smallmatrix} 0,005 \\ 0,004 \end{smallmatrix}$ | 0,024 | $0,024 \pm 0,001$ |
| 0,943 | | | | 1,913 | | 0,051 | | 0,022 | |
| 0,996 | | | | | | 0,050 | | 0,025 | |
| 0,970 | | | | | | 0,053 | | 0,023 | |
| | | | | | | 0,059 | | 0,023 | |
| | | | | | | | | 0,024 | |

Tabelle 8.107: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,6 Mol% Butanal und 49,9 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Butanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|--|----------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-------------------|-----------|-------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,925 | $0,898 \pm \begin{smallmatrix} 0,027 \\ 0,035 \end{smallmatrix}$ | 1,0 | 1,0 | 1,700 | $1,73 \pm 0,03$ | 0,051 | $0,049 \pm 0,005$ | 0,022 | $0,021 \pm 0,003$ |
| 0,863 | | | | 1,763 | | 0,045 | | 0,019 | |
| 0,921 | | | | | | 0,044 | | 0,023 | |
| 0,883 | | | | | | 0,053 | | 0,021 | |
| | | | | | | 0,054 | | 0,024 | |
| | | | | | | | | 0,020 | |

Tabelle 8.108: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 59,4 Mol% Butanal und 40,0 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Butanal

| Butanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|--|----------|-------------|-----------|--|-----------|---|-----------|-------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,969 \pm \begin{smallmatrix} 0,032 \\ 0,036 \end{smallmatrix}$ | 0,377 | 0,377 | 0,946 | $0,979 \pm \begin{smallmatrix} 0,031 \\ 0,033 \end{smallmatrix}$ | 0,041 | $0,038 \pm \begin{smallmatrix} 0,03 \\ 0,004 \end{smallmatrix}$ | 0,017 | $0,017 \pm 0,003$ |
| 0,956 | | | | 0,981 | | 0,035 | | 0,014 | |
| 0,986 | | | | 1,01 | | 0,034 | | 0,02 | |
| 0,932 | | | | | | 0,041 | | 0,019 | |
| | | | | | | 0,038 | | 0,017 | |

Tabelle 8.109: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 59,4 Mol% Butanal und 49,9 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Butanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|----------------------------|----------|-------------|-----------|----------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 2,62 | $2,53 \pm_{0,125}^{0,095}$ | 1,0 | 1,0 | 2,49 | $2,58 \pm_{0,087}^{0,063}$ | 0,112 | $0,100 \pm_{0,011}^{0,012}$ | 0,044 | $0,045 \pm_{0,007}^{0,009}$ |
| 2,48 | | | | 2,60 | | 0,093 | | 0,038 | |
| 2,60 | | | | 2,64 | | 0,089 | | 0,047 | |
| 2,40 | | | | 0,107 | | 0,054 | | | |
| | | | | 0,101 | | 0,044 | | | |

273 KTabelle 8.110: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 39,7 Mol% Butanal und 59,9 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Butanal

| Butanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|--------------------------|----------|-------------|-----------|---------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $1,02 \pm_{0,02}^{0,01}$ | 9,36 | 9,36 | 13,35 | $13,59 \pm_{0,24}^{0,15}$ | 0,195 | $0,189 \pm_{0,030}^{0,027}$ | 0,067 | $0,086 \pm_{0,019}^{0,018}$ |
| 1,03 | | | | 13,74 | | 0,167 | | 0,087 | |
| 1,02 | | | | 13,68 | | 0,153 | | 0,104 | |
| | | | | | | 0,215 | | | |
| | | | | | | 0,216 | | | |

Tabelle 8.111: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 39,7 Mol% Butanal und 59,9 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Butanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|-----------------------------|----------|-------------|-----------|--------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|---------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,107 | $0,108 \pm_{0,001}^{0,003}$ | 1,0 | 1,0 | 1,42 | $1,46 \pm_{0,04}^{0,02}$ | 0,021 | $0,020 \pm_{0,002}^{0,003}$ | 0,008 | $0,010 \pm_{0,001}$ |
| 0,111 | | | | 1,48 | | 0,018 | | 0,010 | |
| 0,107 | | | | 1,47 | | 0,019 | | 0,011 | |
| | | | | | | 0,021 | | | |
| | | | | | | 0,023 | | | |

Tabelle 8.112: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,6 Mol% Butanal und 49,9 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Butanal

| Butanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|-------------------------|----------|-------------|-----------|--------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $1,0 \pm_{0,04}^{0,06}$ | 1,45 | 1,45 | 5,00 | $5,10 \pm_{0,10}^{0,08}$ | 0,193 | $0,192 \pm_{0,012}^{0,017}$ | 0,078 | $0,076 \pm_{0,009}^{0,007}$ |
| 0,96 | | | | 5,18 | | 0,180 | | 0,076 | |
| 0,98 | | | | 5,13 | | 0,194 | | 0,067 | |
| 1,06 | | | | | | 0,209 | | 0,083 | |
| | | | | | | 0,195 | | 0,078 | |
| | | | | | | 0,182 | | | |

Tabelle 8.113: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,6 Mol% Butanal und 49,9 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Butanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|-----------------------------|----------|-------------|-----------|--------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,693 | $0,693 \pm_{0,032}^{0,055}$ | 1,0 | 1,0 | 3,64 | $3,61 \pm_{0,02}^{0,03}$ | 0,130 | $0,129 \pm_{0,009}^{0,008}$ | 0,055 | $0,053 \pm_{0,008}^{0,003}$ |
| 0,668 | | | | 3,59 | | 0,120 | | 0,045 | |
| 0,661 | | | | 3,61 | | 0,131 | | 0,054 | |
| 0,748 | | | | | | 0,137 | | 0,056 | |
| | | | | | | 0,125 | | 0,054 | |

Tabelle 8.114: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 59,4 Mol% Butanal und 40,0 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Butanal

| Butanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|--------------------------|----------|-------------|-----------|--------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $1,02 \pm_{0,02}^{0,05}$ | 0,23 | 0,23 | 1,74 | $1,76 \pm_{0,03}^{0,06}$ | 0,121 | $0,122 \pm_{0,009}^{0,012}$ | 0,051 | $0,054 \pm_{0,005}^{0,008}$ |
| 1,01 | | | | 1,73 | | 0,116 | | 0,049 | |
| 0,98 | | | | 1,82 | | 0,134 | | 0,060 | |
| 1,07 | | | | | | 0,127 | | 0,062 | |
| | | | | | | 0,120 | | 0,051 | |
| | | | | | | 0,125 | | 0,051 | |
| | | | | | | 0,113 | | | |

Tabelle 8.115: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 59,4 Mol% Butanal und 49,9 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Butanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|--------------------------|----------|-------------|-----------|--------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 4,40 | $4,47 \pm_{0,18}^{0,29}$ | 1,0 | 1,0 | 7,69 | $7,85 \pm_{0,16}^{0,19}$ | 0,536 | $0,557 \pm_{0,026}^{0,033}$ | 0,222 | $0,238 \pm_{0,035}^{0,054}$ |
| 4,42 | | | | 7,83 | | 0,565 | | 0,218 | |
| 4,29 | | | | 8,04 | | 0,590 | | 0,263 | |
| 4,75 | | | | | | 0,568 | | 0,292 | |
| | | | | | | 0,531 | | 0,231 | |
| | | | | | | 0,552 | | 0,203 | |

255 K

Tabelle 8.116: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,6 Mol% Butanal und 49,9 Mol% Methanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Butanal

| Butanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|--------------------------|----------|-------------|-----------|------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $1,03 \pm_{0,07}^{0,14}$ | 1,887 | 1,887 | 10,889 | 11,19 \pm 0,30 | 0,381 | $0,375 \pm_{0,015}^{0,017}$ | 0,159 | $0,167 \pm_{0,016}^{0,025}$ |
| 0,974 | | | | 11,497 | | 0,36 | | 0,151 | |
| 0,958 | | | | | | 0,368 | | 0,192 | |
| 1,167 | | | | | | 0,393 | | | |

Tabelle 8.117: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,6 Mol% Butanal und 49,9 Mol% Methanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Butanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|-----------------------------|----------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,514 | $0,525 \pm_{0,056}^{0,092}$ | 1,0 | 1,0 | 5,82 | $5,94 \pm 0,12$ | 0,176 | $0,181 \pm_{0,013}^{0,014}$ | 0,076 | $0,076 \pm_{0,012}^{0,013}$ |
| 0,499 | | | | 6,06 | | 0,168 | | 0,064 | |
| 0,469 | | | | | | 0,184 | | 0,089 | |
| 0,617 | | | | | | 0,195 | | | |

8.1.3.8 Butanal + Ethanol

295 K

Tabelle 8.118: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 19,8 Mol% Butanal und 78,4 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Butanal

| Butanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|---------|-----------------------------|---------|------------------|-----------|--------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $0,962 \pm_{0,040}^{0,038}$ | 13,35 | $13,23 \pm 0,13$ | 3,26 | $3,29 \pm_{0,11}^{0,17}$ |
| 0,956 | | 13,10 | | 3,18 | |
| 0,971 | | | | 3,34 | |
| 0,922 | | | | 3,46 | |
| | | | | 3,27 | |
| | | | | 3,23 | |

Tabelle 8.119: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 19,8 Mol% Butanal und 78,4 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Butanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|---------|-----------------------------|---------|-------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,072 | $0,070 \pm_{0,003}^{0,002}$ | 1,0 | $0,986 \pm 0,014$ | 0,244 | $0,242 \pm_{0,007}^{0,008}$ |
| 0,069 | | 0,972 | | 0,235 | |
| 0,070 | | | | 0,245 | |
| 0,067 | | | | 0,250 | |
| | | | | 0,240 | |
| | | | | 0,238 | |

Tabelle 8.120: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 39,2 Mol% Butanal und 59,2 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Butanal

| Butanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|---------|--------------------------|---------|-----------------|-----------|--------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,0 | $1,02 \pm_{0,02}^{0,01}$ | 2,93 | $2,96 \pm 0,02$ | 1,74 | $1,83 \pm_{0,09}^{0,17}$ | 0,040 | $0,038 \pm_{0,007}^{0,004}$ |
| 1,03 | | 2,98 | | 1,88 | | 0,031 | |
| 1,03 | | | | 1,83 | | 0,041 | |
| | | | | 1,84 | | 0,038 | |
| | | | | 1,85 | | | |
| | | | | 2,00 | | | |

Tabelle 8.121: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 39,2 Mol% Butanal und 59,2 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Butanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|---------|-----------------------------|---------|-----------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 0,339 | $0,356 \pm_{0,017}^{0,024}$ | 1,0 | $1,01 \pm 0,01$ | 0,595 | $0,630 \pm_{0,035}^{0,049}$ | 0,014 | $0,013 \pm_{0,002}^{0,001}$ |
| 0,348 | | 1,02 | | 0,624 | | 0,011 | |
| 0,356 | | | | 0,625 | | 0,014 | |
| 0,379 | | | | 0,631 | | 0,013 | |
| | | | | 0,624 | | | |
| | | | | 0,678 | | | |

Tabelle 8.122: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,3 Mol% Butanal und 49,2 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Butanal

| Butanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|--------------------------|---------|-----------------|-----------|------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $1,01 \pm_{0,02}^{0,06}$ | 1,066 | $1,08 \pm 0,02$ | 1,010 | $1,030 \pm 0,02$ | 0,036 | $0,036 \pm_{0,003}^{0,002}$ | 0,019 | $0,019 \pm_{0,002}^{0,001}$ |
| 0,992 | | 1,096 | | 1,042 | | 0,037 | | 0,017 | |
| 1,067 | | | | 1,037 | | 0,033 | | 0,019 | |
| 0,982 | | | | | | 0,039 | | 0,020 | |

Tabelle 8.123: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,3 Mol% Butanal und 49,2 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Butanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|---------------------------|---------|-----------------|-----------|--------------------------|-----------|-------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,937 | $0,942 \pm_{0,03}^{0,05}$ | 1,0 | $1,02 \pm 0,02$ | 1,038 | $0,98 \pm_{0,04}^{0,06}$ | 0,032 | $0,033 \pm 0,002$ | 0,018 | $0,017 \pm_{0,002}^{0,001}$ |
| 0,925 | | 1,033 | | 0,941 | | 0,035 | | 0,016 | |
| 0,992 | | | | 0,972 | | 0,031 | | 0,017 | |
| 0,916 | | | | 0,972 | | 0,035 | | 0,019 | |

Tabelle 8.124: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,2 Mol% Butanal und 39,4 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Butanal

| Butanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|-----------------------------|---------|-------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,945 \pm_{0,051}^{0,055}$ | 0,418 | $0,441 \pm 0,023$ | 0,557 | $0,574 \pm_{0,023}^{0,031}$ | 0,030 | $0,027 \pm_{0,004}^{0,003}$ | 0,010 | $0,012 \pm 0,002$ |
| 0,925 | | 0,463 | | 0,583 | | 0,028 | | 0,010 | |
| 0,962 | | | | 0,605 | | 0,023 | | 0,013 | |
| 0,894 | | | | 0,551 | | 0,026 | | 0,012 | |
| | | | | | | | | 0,014 | |

Tabelle 8.125: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,2 Mol% Butanal und 39,4 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Butanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|-----------------|---------|-----------------|-----------|--------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 2,41 | $2,27 \pm 0,14$ | 1,0 | $1,04 \pm 0,04$ | 1,35 | $1,41 \pm_{0,06}^{0,09}$ | 0,075 | $0,067 \pm_{0,016}^{0,014}$ | 0,024 | $0,027 \pm_{0,004}^{0,009}$ |
| 2,23 | | 1,08 | | 1,41 | | 0,067 | | 0,023 | |
| 2,32 | | | | 1,50 | | 0,051 | | 0,028 | |
| 2,13 | | | | 1,37 | | 0,081 | | 0,036 | |
| | | | | | | 0,063 | | 0,024 | |

Tabelle 8.126: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 79,6 Mol% Butanal und 19,2 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Butanal

| Butanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|-----------------------------|---------|-------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-------------------|-----------|-------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,967 \pm_{0,036}^{0,033}$ | 0,086 | $0,090 \pm 0,004$ | 0,176 | $0,185 \pm_{0,009}^{0,011}$ | 0,010 | $0,012 \pm 0,002$ | 0,007 | $0,006 \pm 0,002$ |
| 0,938 | | 0,094 | | 0,196 | | 0,013 | | 0,005 | |
| 1,000 | | | | 0,182 | | 0,012 | | 0,007 | |
| 0,931 | | | | | | 0,014 | | 0,005 | |
| | | | | | | | | 0,008 | |

Tabelle 8.127: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 79,6 Mol% Butanal und 19,2 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Butanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|---------------------------|---------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 11,75 | $11,34 \pm_{0,43}^{0,42}$ | 1,0 | $1,01 \pm 0,01$ | 2,06 | $2,17 \pm 0,11$ | 0,128 | $0,128 \pm_{0,016}^{0,015}$ | 0,078 | $0,067 \pm_{0,014}^{0,011}$ |
| 10,94 | | 1,01 | | 2,28 | | 0,129 | | 0,053 | |
| 11,76 | | | | 2,17 | | 0,112 | | 0,075 | |
| 10,91 | | | | | | 0,143 | | 0,062 | |
| | | | | | | | | | |

273 KTabelle 8.128: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 39,2 Mol% Butanal und 59,2 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Butanal

| Butanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|-----------------------------|---------|------------------|-----------|--------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,987 \pm_{0,023}^{0,024}$ | 4,20 | $4,20 \pm 0,005$ | 5,06 | $5,05 \pm_{0,09}^{0,06}$ | 0,138 | $0,146 \pm_{0,022}^{0,016}$ | 0,031 | $0,032 \pm 0,001$ |
| 0,964 | | 4,19 | | 5,06 | | 0,124 | | 0,032 | |
| 0,972 | | | | 4,96 | | 0,160 | | | |
| 1,010 | | | | 5,11 | | 0,162 | | | |

Tabelle 8.129: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 39,2 Mol% Butanal und 59,2 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Butanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|-----------------------------|---------|----------------|-----------|--------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,238 | $0,235 \pm_{0,005}^{0,006}$ | 1,0 | $1,0 \pm 0,02$ | 1,21 | $1,21 \pm_{0,02}^{0,01}$ | 0,032 | $0,034 \pm_{0,004}^{0,005}$ | 0,009 | $0,011 \pm_{0,002}^{0,001}$ |
| 0,231 | | 1,0 | | 1,22 | | 0,030 | | 0,012 | |
| 0,230 | | | | 1,19 | | 0,039 | | 0,012 | |
| 0,241 | | | | 1,21 | | 0,035 | | | |

Tabelle 8.130: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,3 Mol% Butanal und 49,2 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Butanal

| Butanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|-----------------------------|---------|-------------|-----------|--------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,999 \pm_{0,033}^{0,062}$ | 1,33 | 1,33 | 2,81 | $2,84 \pm_{0,13}^{0,19}$ | 0,128 | $0,139 \pm_{0,014}^{0,009}$ | 0,062 | $0,062 \pm_{0,009}^{0,007}$ |
| 0,968 | | 1,33 | | 2,71 | | 0,139 | | 0,063 | |
| 0,966 | | | | 3,03 | | 0,148 | | 0,053 | |
| 1,060 | | | | 2,82 | | 0,143 | | 0,069 | |
| | | | | | | 0,135 | | | |

Tabelle 8.131: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,3 Mol% Butanal und 49,2 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Butanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|-----------------------------|---------|-----------------|-----------|--------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,753 | $0,744 \pm_{0,031}^{0,052}$ | 1,00 | $1,02 \pm 0,02$ | 2,09 | $2,13 \pm_{0,09}^{0,15}$ | 0,093 | $0,113 \pm_{0,020}^{0,026}$ | 0,047 | $0,048 \pm_{0,008}^{0,006}$ |
| 0,713 | | 1,03 | | 2,03 | | 0,103 | | 0,047 | |
| 0,715 | | | | 2,27 | | 0,114 | | 0,054 | |
| 0,796 | | | | 2,11 | | 0,139 | | 0,040 | |
| | | | | | | 0,108 | | 0,052 | |
| | | | | | | 0,108 | | | |
| | | | | | | 0,129 | | | |

Tabelle 8.132: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,2 Mol% Butanal und 39,4 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Butanal

| Butanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|--------------------------|---------|--------------------|-----------|--------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|---------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,99 \pm_{0,01}^{0,04}$ | 0,339 | $0,345 \pm_{0,01}$ | 1,23 | $1,32 \pm_{0,09}^{0,15}$ | 0,108 | $0,111 \pm_{0,007}^{0,011}$ | 0,049 | $0,049 \pm_{0,005}$ |
| 0,99 | | 0,350 | | 1,26 | | 0,104 | | 0,044 | |
| 0,98 | | | | 1,47 | | 0,111 | | 0,054 | |
| 1,03 | | | | 1,32 | | 0,111 | | 0,050 | |
| | | | | | | 0,122 | | 0,045 | |
| | | | | | | | | 0,051 | |

Tabelle 8.133: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,2 Mol% Butanal und 39,4 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Butanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|--------------------------|---------|-------------------|-----------|--------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 2,93 | $2,93 \pm_{0,07}^{0,09}$ | 1,0 | $1,01 \pm_{0,01}$ | 3,66 | $3,86 \pm_{0,21}^{0,40}$ | 0,328 | $0,334 \pm_{0,026}^{0,032}$ | 0,152 | $0,142 \pm_{0,018}^{0,017}$ |
| 2,90 | | 1,02 | | 3,65 | | 0,308 | | 0,124 | |
| 2,86 | | | | 4,26 | | 0,327 | | 0,159 | |
| 3,02 | | | | 3,87 | | 0,339 | | 0,140 | |
| | | | | | | 0,329 | | 0,132 | |
| | | | | | | 0,321 | | 0,151 | |
| | | | | | | 0,366 | | 0,136 | |
| | | | | | | 0,352 | | | |

255 KTabelle 8.134: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,3 Mol% Butanal und 49,2 Mol% Ethanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Butanal

| Butanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|-----------------------------|---------|-------------------|-----------|-------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,996 \pm_{0,063}^{0,073}$ | 1,635 | $1,70 \pm_{0,06}$ | 6,072 | $6,21 \pm_{0,13}$ | 0,258 | $0,269 \pm_{0,012}^{0,029}$ | 0,142 | $0,142 \pm_{0,014}^{0,012}$ |
| 0,933 | | 1,755 | | 6,341 | | 0,260 | | 0,154 | |
| 0,981 | | | | | | 0,261 | | 0,144 | |
| 1,069 | | | | | | 0,299 | | 0,128 | |
| | | | | | | | | | |

Tabelle 8.135: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,3 Mol% Butanal und 49,2 Mol% Ethanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Butanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|-----------------------------|---------|-------------------|-----------|-------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,600 | $0,598 \pm_{0,037}^{0,041}$ | 1,00 | $1,01 \pm_{0,01}$ | 3,79 | $3,84 \pm_{0,04}$ | 0,131 | $0,135 \pm_{0,004}^{0,003}$ | 0,071 | $0,075 \pm_{0,004}^{0,009}$ |
| 0,561 | | 1,01 | | 3,88 | | 0,135 | | 0,084 | |
| 0,592 | | | | | | 0,135 | | 0,074 | |
| 0,639 | | | | | | 0,138 | | 0,072 | |
| | | | | | | | | | |

8.1.3.9 Butanal + 1-Propanol

295 K

Tabelle 8.136: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 20,0 Mol% Butanal und 80,0 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Butanal

| Butanal | | 1-Propanol | | HA 1 | |
|---------|--------------------------|------------|---------------------------|-----------|----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $0,98 \pm_{0,08}^{0,06}$ | 10,92 | $10,88 \pm_{0,54}^{0,49}$ | 3,25 | $3,22 \pm_{0,144}^{0,076}$ |
| 0,90 | | 11,37 | | 3,23 | |
| 1,04 | | 10,34 | | 3,30 | |
| 0,98 | | | | 3,29 | |
| | | | | 3,28 | |
| | | | | 3,08 | |
| | | | | 3,14 | |

Tabelle 8.137: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 20,0 Mol% Butanal und 80,0 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Butanal | | 1-Propanol | | HA 1 | |
|---------|----------------------------|------------|------------------------|-----------|----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,093 | $0,093\pm_{0,008}^{0,006}$ | 1,0 | $1,0\pm_{0,04}^{0,05}$ | 0,299 | $0,297\pm_{0,011}^{0,008}$ |
| 0,085 | | 1,05 | | 0,297 | |
| 0,099 | | 0,96 | | 0,300 | |
| 0,094 | | | | 0,305 | |
| | | | | 0,299 | |
| | | | 0,286 | | |
| | | | | 0,291 | |

Tabelle 8.138: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 40,0 Mol% Butanal und 60,0 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Butanal

| Butanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|---------|-----------------------------|------------|--------------------------|-----------|----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,0 | $0,990 \pm_{0,035}^{0,041}$ | 1,91 | $1,93 \pm_{0,05}^{0,06}$ | 1,44 | $1,46 \pm_{0,089}^{0,041}$ | 0,041 | $0,039 \pm_{0,005}^{0,004}$ |
| 0,955 | | 1,99 | | 1,37 | | 0,034 | |
| 1,030 | | 1,88 | | 1,48 | | 0,039 | |
| 0,973 | | | | 1,48 | | 0,040 | |
| | | | | 1,50 | | | |
| | | | | 1,46 | | | |
| | | 1,48 | | | | | |

Tabelle 8.139: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 40,0 Mol% Butanal und 60,0 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Butanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|---------|-------------|------------|-----------------|-----------|--|-----------|--|
| A_B | \bar{A}_B | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 0,538 | 0,531±0,02 | 1,0 | 1,03±0,03 | 0,734 | 0,781± ^{0,033} _{0,047} | 0,023 | 0,022± ^{0,006} _{0,004} |
| 0,511 | | 1,06 | | 0,784 | | 0,018 | |
| 0,552 | | 1,02 | | 0,791 | | 0,018 | |
| 0,523 | | | | 0,814 | | 0,021 | |
| | | | | 0,784 | | 0,028 | |

Tabelle 8.140: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 50,0 Mol% Butanal und 50,0 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Butanal

| Butanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|---------------------------------------|------------|-----------------|-----------|---------------------------------------|-----------|-----------------|-----------|--|
| A_B | \bar{A}_B | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | 1,02± ^{0,05} _{0,02} | 1,141 | 1,15±0,04 | 1,023 | 1,09± ^{0,05} _{0,07} | 0,042 | 0,039±0,003 | 0,012 | 0,014± ^{0,003} _{0,002} |
| 1,008 | | 1,185 | | 1,129 | | 0,037 | | 0,015 | |
| 1,064 | | 1,108 | | 1,084 | | 0,036 | | 0,017 | |
| 0,995 | | | | 1,143 | | 0,040 | | 0,013 | |
| | | | | | | 0,042 | | | |

Tabelle 8.141: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 50,0 Mol% Butanal und 50,0 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Butanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|--|------------|--|-----------|--|-----------|-----------------|-----------|--|
| A_B | \bar{A}_B | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,868 | 0,884± ^{0,042} _{0,018} | 1,0 | 0,996± ^{0,032} _{0,036} | 0,894 | 0,962± ^{0,035} _{0,013} | 0,040 | 0,035±0,004 | 0,011 | 0,012± ^{0,001} _{0,002} |
| 0,876 | | 1,028 | | 0,997 | | 0,033 | | 0,014 | |
| 0,926 | | 0,960 | | 0,949 | | 0,032 | | 0,014 | |
| 0,866 | | | | 0,995 | | 0,036 | | 0,011 | |
| | | | | 0,976 | | 0,037 | | | |

Tabelle 8.142: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 60,1 Mol% Butanal und 39,9 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Butanal

| Butanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|--|------------|--|-----------|--|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | 0,996± ^{0,024} _{0,041} | 0,472 | 0,476± ^{0,009} _{0,005} | 0,610 | 0,631± ^{0,023} _{0,021} | 0,030 | 0,028±0,002 | 0,012 | 0,012±0,002 |
| 1,010 | | 0,485 | | 0,617 | | 0,029 | | 0,010 | |
| 1,020 | | 0,471 | | 0,640 | | 0,026 | | 0,013 | |
| 0,955 | | | | 0,633 | | 0,028 | | 0,011 | |
| | | | | 0,654 | | | | | |

Tabelle 8.143: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 60,1 Mol% Butanal und 39,9 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Butanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|--------------------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 2,17 | $2,15 \pm_{0,09}^{0,04}$ | 1,0 | $1,03 \pm 0,03$ | 1,32 | $1,37 \pm 0,05$ | 0,062 | $0,061 \pm 0,003$ | 0,023 | $0,025 \pm_{0,002}^{0,003}$ |
| 2,18 | | 1,06 | | 1,35 | | 0,059 | | 0,024 | |
| 2,19 | | 1,03 | | 1,38 | | 0,058 | | 0,027 | |
| 2,06 | | | | 1,36 | | 0,064 | | 0,028 | |
| | | | | 1,42 | | 0,060 | | 0,025 | |

Tabelle 8.144: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 80,0 Mol% Butanal und 20,0 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Butanal

| Butanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|-------------------------|------------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $1,0 \pm_{0,02}^{0,03}$ | 0,083 | $0,088 \pm_{0,005}^{0,006}$ | 0,177 | $0,189 \pm_{0,012}^{0,014}$ | 0,014 | $0,013 \pm_{0,003}^{0,001}$ | 0,008 | $0,006 \pm_{0,001}^{0,002}$ |
| 0,98 | | 0,094 | | 0,203 | | 0,014 | | 0,006 | |
| 1,03 | | 0,088 | | 0,195 | | 0,010 | | 0,006 | |
| 0,99 | | | | 0,182 | | 0,013 | | 0,006 | |
| | | | | | | 0,012 | | 0,006 | |
| | | | | | | 0,013 | | | |

Tabelle 8.145: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 80,0 Mol% Butanal und 20,0 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Butanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|---------------------------|------------|--------------------------|-----------|--------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 12,22 | $12,19 \pm_{0,23}^{0,29}$ | 1,0 | $1,05 \pm_{0,05}^{0,06}$ | 2,14 | $2,28 \pm_{0,14}^{0,13}$ | 0,151 | $0,151 \pm_{0,028}^{0,014}$ | 0,094 | $0,084 \pm_{0,014}^{0,010}$ |
| 11,96 | | 1,11 | | 2,41 | | 0,164 | | 0,074 | |
| 12,48 | | 1,05 | | 2,38 | | 0,123 | | 0,087 | |
| 12,11 | | | | 2,20 | | 0,158 | | 0,093 | |
| | | | | | | 0,146 | | 0,070 | |
| | | | | | | 0,161 | | | |

273 KTabelle 8.146: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 40,0 Mol% Butanal und 60,0 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Butanal

| Butanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|---------|---------------------------|------------|--------------------------|-----------|--------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,0 | $1,043 \pm_{0,04}^{0,06}$ | 5,447 | $5,53 \pm_{0,14}^{0,22}$ | 6,179 | $6,25 \pm_{0,26}^{0,24}$ | 0,177 | $0,160 \pm_{0,018}^{0,017}$ |
| 1,022 | | 5,386 | | 6,174 | | 0,142 | |
| 1,045 | | 5,742 | | 5,994 | | 0,151 | |
| 1,105 | | | | 6,418 | | 0,170 | |
| | | | | 6,494 | | | |

Tabelle 8.147: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 40,0 Mol% Butanal und 60,0 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Butanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|---------|-----------------------------|------------|--------------------------|-----------|--------------------------|-----------|-------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 0,178 | $0,191 \pm_{0,013}^{0,019}$ | 1,0 | $1,01 \pm_{0,01}^{0,02}$ | 1,12 | $1,11 \pm_{0,04}^{0,06}$ | 0,032 | $0,029 \pm 0,003$ |
| 0,185 | | 0,997 | | 1,12 | | 0,026 | |
| 0,191 | | 1,030 | | 1,07 | | 0,027 | |
| 0,210 | | | | 1,09 | | 0,031 | |
| | | | | 1,17 | | | |

Tabelle 8.148: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 50,0 Mol% Butanal und 50,0 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Butanal

| Butanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|--------------------------|------------|--------------------------|-----------|--------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $1,02 \pm_{0,02}^{0,04}$ | 1,42 | $1,42 \pm_{0,02}^{0,03}$ | 3,04 | $3,06 \pm_{0,14}^{0,19}$ | 0,182 | $0,166 \pm_{0,023}^{0,016}$ | 0,067 | $0,062 \pm_{0,007}^{0,005}$ |
| 1,00 | | 1,40 | | 2,93 | | 0,167 | | 0,065 | |
| 1,00 | | 1,45 | | 2,92 | | 0,173 | | 0,055 | |
| 1,06 | | | | 3,25 | | 0,143 | | | |
| | | | | 3,15 | | | | | |

Tabelle 8.149: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 50,0 Mol% Butanal und 50,0 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Butanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|-----------------------------|------------|--------------------------|-----------|--------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,707 | $0,716 \pm_{0,013}^{0,031}$ | 1,0 | $1,01 \pm_{0,02}^{0,03}$ | 2,13 | $2,15 \pm_{0,11}^{0,14}$ | 0,120 | $0,116 \pm_{0,019}^{0,012}$ | 0,049 | $0,044 \pm_{0,008}^{0,005}$ |
| 0,706 | | 0,994 | | 2,04 | | 0,112 | | 0,047 | |
| 0,703 | | 1,040 | | 2,09 | | 0,121 | | 0,036 | |
| 0,747 | | | | 2,29 | | 0,097 | | | |
| | | | | 2,22 | | 0,128 | | | |

Tabelle 8.150: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 60,1 Mol% Butanal und 39,9 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Butanal

| Butanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|--------------------------|------------|--------------------------|-----------|--------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $1,02 \pm_{0,02}^{0,04}$ | 0,37 | $0,38 \pm_{0,01}^{0,01}$ | 1,26 | $1,33 \pm_{0,08}^{0,17}$ | 0,117 | $0,119 \pm_{0,004}^{0,003}$ | 0,043 | $0,043 \pm_{0,003}^{0,004}$ |
| 1,03 | | 0,37 | | 1,25 | | 0,115 | | 0,040 | |
| 1,00 | | 0,39 | | 1,29 | | 0,122 | | 0,047 | |
| 1,06 | | | | 1,50 | | 0,121 | | 0,042 | |
| | | | | 1,34 | | | | | |

Tabelle 8.151: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 60,1 Mol% Butanal und 39,9 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Butanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|--------------------------|------------|----------------------------|-----------|--------------------------|-----------|---------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 2,69 | $2,69 \pm_{0,11}^{0,12}$ | 1,0 | $1,01 \pm_{0,009}^{0,014}$ | 3,24 | $3,55 \pm_{0,31}^{0,49}$ | 0,329 | $0,325 \pm_{0,022}$ | 0,118 | $0,117 \pm_{0,013}^{0,012}$ |
| 2,69 | | 0,997 | | 3,35 | | 0,303 | | 0,104 | |
| 2,58 | | 1,020 | | 3,47 | | 0,326 | | 0,127 | |
| 2,81 | | | | 4,04 | | 0,347 | | 0,129 | |
| | | | | 3,65 | | 0,318 | | 0,109 | |

255 K

Tabelle 8.152: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 50,0 Mol% Butanal und 50,0 Mol% 1-Propanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Butanal

| Butanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|---------------------------|------------|--------------------------|-----------|--------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,996 \pm_{0,07}^{0,05}$ | 1,747 | $1,80 \pm_{0,05}^{0,10}$ | 6,272 | $6,59 \pm_{0,43}^{0,30}$ | 0,335 | $0,305 \pm_{0,019}^{0,031}$ | 0,126 | $0,125 \pm_{0,002}^{0,001}$ |
| 0,922 | | 1,747 | | 6,842 | | 0,286 | | 0,123 | |
| 1,019 | | 1,903 | | 6,162 | | 0,289 | | 0,125 | |
| 1,045 | | | | 6,803 | | 0,308 | | | |
| | | | | 6,893 | | | | | |

Tabelle 8.153: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 50,0 Mol% Butanal und 50,0 Mol% 1-Propanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Butanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|-----------------------------|------------|--------------------------|-----------|-------------------|-----------|-----------------------------|-----------|---------------------|
| A_B | \bar{A}_B | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,542 | $0,549 \pm_{0,036}^{0,045}$ | 1,0 | $1,02 \pm_{0,02}^{0,04}$ | 3,56 | $3,68 \pm_{0,13}$ | 0,172 | $0,156 \pm_{0,015}^{0,017}$ | 0,046 | $0,051 \pm_{0,005}$ |
| 0,513 | | 1,0 | | 3,76 | | 0,141 | | 0,050 | |
| 0,548 | | 1,06 | | 3,55 | | 0,142 | | 0,056 | |
| 0,594 | | | | 3,74 | | 0,167 | | | |
| | | | | 3,81 | | | | | |

8.1.3.10 Heptanal + Methanol

295 K

Tabelle 8.154: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 9,7 Mol% Heptanal und 90,0 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Heptanal

| Heptanal | | Methanol | | HA 1 | |
|----------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,00 | 1,06 | 69,17 | 69,17 | 10,88 | 11,27 |
| 1,02 | | | | 10,88 | |
| 1,04 | | | | 11,57 | |
| 1,17 | | | | 11,55 | |
| | | | | 11,53 | |
| | | | | 11,19 | |

Tabelle 8.155: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 9,7 Mol% Heptanal und 90,0 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Heptanal | | Methanol | | HA 1 | |
|----------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,014 | 0,015 | 1,0 | 1,0 | 0,153 | 0,162 |
| 0,013 | | | | 0,156 | |
| 0,016 | | | | 0,165 | |
| 0,016 | | | | 0,169 | |
| | | | | 0,164 | |
| | | | | 0,163 | |

Tabelle 8.156: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 24,0 Mol% Heptanal und 75,3 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Heptanal

| Heptanal | | Methanol | | HA 1 | |
|----------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | 0,984 | 19,17 | 19,17 | 7,38 | 7,64 |
| 0,960 | | | | 7,45 | |
| 0,996 | | | | 7,71 | |
| 0,978 | | | | 7,79 | |
| | | | | 7,88 | |
| | | | | 7,63 | |

Tabelle 8.157: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 24,0 Mol% Heptanal und 75,3 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Heptanal | | Methanol | | HA 1 | |
|----------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,051 | 0,048 | 1,0 | 1,0 | 0,389 | 0,395 |
| 0,044 | | | | 0,386 | |
| 0,051 | | | | 0,394 | |
| 0,047 | | | | 0,410 | |
| | | | | 0,398 | |
| | | | | 0,395 | |

Tabelle 8.158: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,6 Mol% Heptanal und 49,9 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Heptanal

| Heptanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | 1,020 | 1,169 | 1,169 | 1,933 | 2,012 | 0,052 | 0,049 | 0,024 | 0,024 |
| 0,994 | | | | 2,081 | | 0,047 | | 0,023 | |
| 0,984 | | | | 2,020 | | 0,047 | | 0,024 | |
| 1,088 | | | | | | 0,049 | | | |
| 1,053 | | | | | | 0,049 | | | |
| 1,001 | | | | | | | | | |

Tabelle 8.159: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,6 Mol% Heptanal und 49,9 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Heptanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,862 | 0,880 | 1,0 | 1,0 | 1,659 | 1,740 | 0,045 | 0,042 | 0,020 | 0,020 |
| 0,850 | | | | 1,812 | | 0,039 | | 0,020 | |
| 0,843 | | | | 1,751 | | 0,041 | | 0,019 | |
| 0,943 | | | | | | 0,040 | | | |
| 0,929 | | | | | | 0,043 | | | |
| 0,852 | | | | | | | | | |

Tabelle 8.160: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 71,0 Mol% Heptanal und 26,8 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Heptanal

| Heptanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | 0,983 | 0,107 | 0,107 | 0,459 | 0,462 | 0,021 | 0,022 | 0,011 | 0,012 |
| 0,996 | | | | 0,466 | | 0,021 | | 0,012 | |
| 0,953 | | | | 0,460 | | 0,025 | | 0,014 | |
| 0,992 | | | | | | | | | |
| 0,974 | | | | | | | | | |

Tabelle 8.161: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 71,0 Mol% Heptanal und 26,8 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Heptanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 9,76 | 9,49 | 1,0 | 1,0 | 4,51 | 4,55 | 0,202 | 0,212 | 0,141 | 0,132 |
| 9,64 | | | | 4,61 | | 0,202 | | 0,116 | |
| 9,26 | | | | 4,53 | | 0,231 | | 0,139 | |
| 9,67 | | | | | | | | | |
| 9,11 | | | | | | | | | |

Tabelle 8.162: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 87,7 Mol% Heptanal und 9,6 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Heptanal

| Heptanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | 0,965 | 0,032 | 0,032 | 0,086 | 0,090 | 0,008 | 0,007 | 0,003 | 0,003 |
| 0,940 | | 0,032 | | 0,096 | | 0,006 | | 0,003 | |
| 0,952 | | | | 0,087 | | 0,006 | | 0,003 | |
| 0,967 | | | | | | | | | |

Tabelle 8.163: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 87,7 Mol% Heptanal und 9,6 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Heptanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|----------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 68,81 | 66,46 | 1,0 | 1,0 | 6,37 | 6,63 | 0,423 | 0,442 |
| 65,82 | | | | 6,76 | | 0,492 | |
| 67,50 | | | | 7,01 | | 0,411 | |
| 63,46 | | | | 6,86 | | | |
| 67,73 | | | | 6,14 | | | |
| 65,41 | | | | | | | |

273 KTabelle 8.164: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 39,0 Mol% Heptanal und 59,8 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Heptanal

| Heptanal | | Methanol | | HA 1 | |
|----------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | 1,0 | 12,343 | 12,343 | 15,691 | 15,535 |
| 0,916 | | | | 14,927 | |
| 1,083 | | | | 15,885 | |
| | | | | 15,638 | |

Tabelle 8.165: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 39,0 Mol% Heptanal und 59,8 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Heptanal | | Methanol | | HA 1 | |
|----------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,080 | 0,081 | 1,0 | 1,0 | 1,283 | 1,275 |
| 0,075 | | | | 1,210 | |
| 0,087 | | | | 1,307 | |
| | | | | 1,299 | |

Tabelle 8.166: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,7 Mol% Heptanal und 49,8 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Heptanal

| Heptanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|----------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,0 | 0,970 | 2,358 | 2,358 | 7,148 | 7,06 | 0,122 | 0,140 |
| 0,971 | | | | 6,886 | | 0,153 | |
| 0,939 | | | | 7,145 | | 0,144 | |

Tabelle 8.167: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,7 Mol% Heptanal und 49,8 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Heptanal | | Methanol | | HA 1 | |
|----------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,424 | 0,408 | 1,0 | 1,0 | 3,023 | 2,975 |
| 0,419 | | | | 2,886 | |
| 0,381 | | | | 3,016 | |

Tabelle 8.168: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,4 Mol% Heptanal und 39,8 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Heptanal

| Heptanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|----------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,0 | 0,981 | 0,126 | 0,126 | 1,3772 | 1,343 | 0,109 | 0,112 |
| 0,968 | | | | 1,272 | | 0,121 | |
| 0,973 | | | | 1,381 | | 0,104 | |

Tabelle 8.169: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,4 Mol% Heptanal und 39,8 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Heptanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|----------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 8,151 | 7,968 | 1,0 | 1,0 | 10,974 | 10,755 | 0,874 | 0,891 |
| 7,842 | | | | 10,265 | | 0,973 | |
| 7,910 | | | | 11,025 | | 0,826 | |

255 K

Probe gefroren

8.1.3.11 Heptanal + Ethanol**295 K**Tabelle 8.170: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 10,0 Mol% Heptanal und 87,9 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Heptanal

| Heptanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|----------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | 1,045 | 57,21 | 57,23 | 5,46 | 5,50 |
| 1,020 | | 57,25 | | 5,44 | |
| 1,010 | | | | 5,63 | |
| 1,060 | | | | 5,58 | |
| 1,090 | | | | 5,45 | |
| 1,090 | | | | 5,40 | |
| | | | | 5,49 | |
| | | | | 5,55 | |

Tabelle 8.171: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 10,0 Mol% Heptanal und 87,9 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Heptanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|----------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,017 | 0,019 | 1,0 | 0,999 | 0,094 | 0,096 |
| 0,018 | | 0,997 | | 0,095 | |
| 0,017 | | | | 0,098 | |
| 0,020 | | | | 0,096 | |
| 0,020 | | | | 0,094 | |
| 0,020 | | | | 0,091 | |
| | | | | 0,099 | |
| | | | | 0,097 | |

Tabelle 8.172: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 24,0 Mol% Heptanal und 73,8 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Heptanal

| Heptanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|----------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | 0,984 | 7,45 | 7,41 | 2,78 | 2,85 |
| 0,964 | | 7,37 | | 2,76 | |
| 0,991 | | | | 2,86 | |
| 1,020 | | | | 2,92 | |
| 0,945 | | | | 2,90 | |
| | | | | 2,85 | |
| | | | | 2,85 | |

Tabelle 8.173: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 24,0 Mol% Heptanal und 73,8 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Heptanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|----------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,131 | 0,129 | 1,0 | 0,992 | 0,372 | 0,383 |
| 0,127 | | 0,983 | | 0,376 | |
| 0,130 | | | | 0,390 | |
| 0,138 | | | | 0,396 | |
| 0,121 | | | | 0,383 | |
| | | | | 0,389 | |
| | | | | 0,378 | |

Tabelle 8.174: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,5 Mol% Heptanal und 49,0 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Heptanal

| Heptanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|----------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,0 | 0,987 | 1,134 | 1,104 | 1,038 | 1,053 | 0,029 | 0,030 |
| 0,963 | | 1,075 | | 1,043 | | 0,028 | |
| 0,988 | | | | 1,047 | | 0,031 | |
| 0,996 | | | | 1,086 | | 0,032 | |
| 0,986 | | | | | | 0,031 | |
| 0,992 | | | | | | | |

Tabelle 8.175: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,5 Mol% Heptanal und 49,0 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Heptanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|----------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 0,887 | 0,874 | 1,0 | 0,975 | 0,919 | 0,934 | 0,025 | 0,026 |
| 0,849 | | 0,950 | | 0,923 | | 0,025 | |
| 0,876 | | | | 0,937 | | 0,027 | |
| 0,892 | | | | 0,958 | | 0,028 | |
| 0,870 | | | | | | 0,027 | |
| 0,872 | | | | | | | |

Tabelle 8.176: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 70,0 Mol% Heptanal und 27,2 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Heptanal

| Heptanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | 1,003 | 0,188 | 0,186 | 0,348 | 0,351 | 0,019 | 0,019 | 0,009 | 0,008 |
| 0,999 | | 0,184 | | 0,339 | | 0,018 | | 0,007 | |
| 0,998 | | | | 0,360 | | 0,017 | | 0,008 | |
| 1,020 | | | | 0,357 | | 0,020 | | 0,009 | |
| 0,997 | | | | | | | | | |

Tabelle 8.177: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 70,0 Mol% Heptanal und 27,2 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Heptanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 5,300 | 5,300 | 1,0 | 0,989 | 1,842 | 1,867 | 0,101 | 0,100 | 0,046 | 0,044 |
| 5,276 | | 0,977 | | 1,815 | | 0,100 | | 0,041 | |
| 5,202 | | | | 1,911 | | 0,092 | | 0,043 | |
| 5,408 | | | | 1,900 | | 0,106 | | 0,047 | |
| 5,316 | | | | | | | | | |

Tabelle 8.178: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 86,6 Mol% Heptanal und 9,5 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Heptanal

| Heptanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | 0,965 | 0,032 | 0,032 | 0,086 | 0,090 | 0,008 | 0,007 | 0,003 | 0,003 |
| 0,940 | | 0,032 | | 0,096 | | 0,006 | | 0,003 | |
| 0,952 | | | | 0,087 | | 0,006 | | 0,003 | |
| 0,967 | | | | | | | | | |

Tabelle 8.179: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 86,6 Mol% Heptanal und 9,5 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Heptanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 31,01 | 29,70 | 1,00 | 0,98 | 2,67 | 2,75 | 0,250 | 0,199 | 0,105 | 0,108 |
| 28,44 | | 0,95 | | 2,88 | | 0,173 | | 0,104 | |
| 29,46 | | | | 2,69 | | 0,175 | | 0,114 | |
| 29,88 | | | | | | | | | |

273 KTabelle 8.180: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 38,6 Mol% Heptanal und 59,0 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Heptanal

| Heptanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|----------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | 0,992 | 6,441 | 6,255 | 6,447 | 6,411 |
| 0,986 | | 6,069 | | 6,463 | |
| 0,991 | | | | 6,562 | |
| | | | | 6,470 | |
| | | | | 6,112 | |

Tabelle 8.181: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 38,6 Mol% Heptanal und 59,0 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Heptanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|----------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,168 | 0,159 | 1,0 | 0,980 | 1,018 | 1,028 |
| 0,155 | | 0,960 | | 1,023 | |
| 0,155 | | | | 1,049 | |
| | | | | 1,067 | |
| | | | | 0,986 | |

Tabelle 8.182: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,2 Mol% Heptanal und 49,3 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Heptanal

| Heptanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | 1,018 | 2,021 | 2,001 | 3,875 | 3,894 | 0,143 | 0,147 | 0,069 | 0,077 |
| 1,060 | | 1,982 | | 3,953 | | 0,151 | | 0,081 | |
| 0,994 | | | | 4,029 | | 0,147 | | 0,082 | |
| | | | | 3,718 | | | | | |

Tabelle 8.183: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,2 Mol% Heptanal und 49,3 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Heptanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 0,522 | 0,522 | 1,0 | 0,998 | 1,959 | 1,976 | 0,076 | 0,076 | 0,034 | 0,040 |
| 0,539 | | 0,996 | | 1,974 | | 0,077 | | 0,044 | |
| 0,504 | | | | 2,032 | | 0,076 | | 0,041 | |
| | | | | 2,028 | | | | | |
| | | | | 1,889 | | | | | |

Tabelle 8.184: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,3 Mol% Heptanal und 39,1 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Heptanal

| Heptanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | 1,013 | 0,473 | 0,466 | 1,536 | 1,637 | 0,111 | 0,115 | 0,050 | 0,057 |
| 1,047 | | 0,459 | | 1,709 | | 0,106 | | 0,060 | |
| 0,992 | | | | 1,742 | | 0,127 | | 0,062 | |
| | | | | 1,563 | | | | | |

Tabelle 8.185: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,3 Mol% Heptanal und 39,1 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Heptanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 2,103 | 2,121 | 1,0 | 0,986 | 3,367 | 3,537 | 0,238 | 0,247 | 0,103 | 0,128 |
| 2,220 | | 0,972 | | 3,680 | | 0,228 | | 0,130 | |
| 2,041 | | | | 3,756 | | 0,274 | | 0,151 | |
| | | | | 3,346 | | | | | |

255 K

Tabelle 8.186: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,2 Mol% Heptanal und 49,3 Mol% Ethanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Heptanal

| Heptanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|----------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | 1,150 | 3,247 | 3,2499 | 8,206 | 8,351 |
| 1,259 | | 3,252 | | 8,386 | |
| 1,192 | | | | 8,575 | |
| | | | | 8,238 | |

Tabelle 8.187: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,2 Mol% Heptanal und 49,3 Mol% Ethanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Heptanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|----------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,309 | 0,359 | 1,0 | 1,006 | 2,513 | 2,561 |
| 0,398 | | 1,012 | | 2,565 | |
| 0,370 | | | | 2,652 | |
| | | | | 2,515 | |

8.1.3.12 Heptanal + 1-Propanol

295 K

Tabelle 8.188: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 9,4 Mol% Heptanal und 89,4 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Heptanal

| Heptanal | | 1-Propanol | | HA 1 | |
|----------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | 1,085 | 36,615 | 37,022 | 4,459 | 4,780 |
| 1,008 | | 36,856 | | 4,725 | |
| 1,064 | | 37,597 | | 4,672 | |
| 1,157 | | | | 4,688 | |
| 1,138 | | | | 4,999 | |
| 1,143 | | | | 4,807 | |
| | | | | 4,678 | |
| | | | | 4,838 | |
| | | | | 5,153 | |

Tabelle 8.189: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 9,4 Mol% Heptanal und 89,4 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Heptanal | | 1-Propanol | | HA 1 | |
|----------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,026 | 0,028 | 1,00 | 1,02 | 0,121 | 0,128 |
| 0,027 | | 1,01 | | 0,129 | |
| 0,029 | | 1,05 | | 0,125 | |
| 0,030 | | | | 0,127 | |
| 0,028 | | | | 0,131 | |
| 0,030 | | | | 0,127 | |
| | | | | 0,125 | |
| | | | | 0,133 | |
| | | | | 0,137 | |

Tabelle 8.190: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 24,3 Mol% Heptanal und 74,3 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Heptanal

| Heptanal | | 1-Propanol | | HA 1 | |
|----------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | 0,978 | 7,446 | 7,576 | 2,551 | 2,729 |
| 0,944 | | 7,539 | | 2,646 | |
| 0,890 | | 7,744 | | 2,749 | |
| 1,006 | | | | 2,752 | |
| 1,064 | | | | 2,817 | |
| 0,963 | | | | 2,639 | |
| | | | | 2,712 | |
| | | | | 2,885 | |
| | | | | 2,812 | |

Tabelle 8.191: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 24,3 Mol% Heptanal und 74,3 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Heptanal | | 1-Propanol | | HA 1 | |
|----------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,134 | 0,129 | 1,00 | 1,02 | 0,346 | 0,363 |
| 0,119 | | 1,02 | | 0,362 | |
| 0,118 | | 1,05 | | 0,351 | |
| 0,131 | | | | 0,365 | |
| 0,131 | | | | 0,363 | |
| 0,139 | | | | 0,351 | |
| | | | | 0,362 | |
| | | | | 0,389 | |
| | | | | 0,381 | |

Tabelle 8.192: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,3 Mol% Heptanal und 49,7 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Heptanal

| Heptanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|----------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,0 | 0,991 | 1,192 | 1,245 | 1,093 | 1,085 | 0,030 | 0,033 |
| 0,968 | | 1,276 | | 1,064 | | 0,029 | |
| 0,971 | | 1,266 | | 1,098 | | 0,034 | |
| 0,963 | | | | | | 0,035 | |
| 1,026 | | | | | | 0,034 | |
| 1,017 | | | | | | | |

Tabelle 8.193: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,3 Mol% Heptanal und 49,7 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Heptanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|----------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 0,832 | 0,827 | 1,0 | 1,036 | 0,908 | 0,904 | 0,025 | 0,028 |
| 0,802 | | 1,056 | | 0,885 | | 0,028 | |
| 0,813 | | 1,053 | | 0,918 | | 0,029 | |
| 0,811 | | | | | | 0,029 | |
| 0,860 | | | | | | 0,029 | |
| 0,841 | | | | | | | |

Tabelle 8.194: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 71,7 Mol% Heptanal und 25,8 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Heptanal

| Heptanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | 0,972 | 0,166 | 0,168 | 0,307 | 0,301 | 0,017 | 0,018 | 0,008 | 0,009 |
| 0,922 | | 0,169 | | 0,295 | | 0,019 | | 0,010 | |
| 0,943 | | 0,167 | | 0,297 | | 0,017 | | 0,009 | |
| 0,986 | | | | 0,305 | | 0,019 | | 0,009 | |
| 0,984 | | | | | | 0,018 | | 0,009 | |
| 0,996 | | | | | | | | | |

Tabelle 8.195: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 71,7 Mol% Heptanal und 25,8 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Heptanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 6,37 | 6,06 | 1,00 | 1,02 | 1,95 | 1,89 | 0,107 | 0,119 | 0,044 | 0,056 |
| 5,83 | | 1,05 | | 1,88 | | 0,123 | | 0,061 | |
| 5,58 | | 1,00 | | 1,88 | | 0,110 | | 0,059 | |
| 6,19 | | | | 1,85 | | 0,137 | | 0,057 | |
| 6,13 | | | | | | 0,117 | | 0,058 | |
| 6,27 | | | | | | | | | |

Tabelle 8.196: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 87,0 Mol% Heptanal und 10,2 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Heptanal

| Heptanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | 0,962 | 0,036 | 0,035 | 0,088 | 0,097 | 0,008 | 0,008 | 0,004 | 0,004 |
| 0,922 | | 0,036 | | 0,105 | | 0,008 | | 0,004 | |
| 0,957 | | 0,034 | | 0,104 | | 0,008 | | 0,003 | |
| 0,972 | | | | 0,095 | | | | | |
| 0,960 | | | | 0,093 | | | | | |

Tabelle 8.197: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 87,0 Mol% Heptanal und 10,2 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Heptanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 31,00 | 29,29 | 1,00 | 1,01 | 2,60 | 2,72 | 0,170 | 0,186 | 0,092 | 0,081 |
| 28,56 | | 1,02 | | 2,64 | | 0,196 | 0,186 | 0,088 | |
| 28,41 | | 1,02 | | 3,03 | | 0,192 | | 0,064 | |
| 28,95 | | | | 2,77 | | | | | |
| 29,52 | | | | 2,57 | | | | | |

273 KTabelle 8.198: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 38,9 Mol% Heptanal und 59,3 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Heptanal

| Heptanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|----------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,0 | 0,997 | 6,507 | 6,867 | 6,874 | 6,946 | 0,217 | 0,172 |
| 0,928 | | 7,302 | | 6,707 | | 0,166 | |
| 1,064 | | 6,791 | | 7,218 | | 0,134 | |
| | | | | 6,986 | | | |

Tabelle 8.199: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 38,9 Mol% Heptanal und 59,3 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Heptanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|----------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 0,153 | 0,152 | 1,0 | 1,055 | 1,060 | 1,073 | 0,035 | 0,027 |
| 0,143 | | 1,122 | | 1,027 | | 0,026 | |
| 0,161 | | 1,044 | | 1,131 | | 0,021 | |
| | | | | 1,074 | | | |

Tabelle 8.200: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,6 Mol% Heptanal und 49,4 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Heptanal

| Heptanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|----------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,0 | 0,996 | 2,115 | 2,166 | 3,731 | 3,892 | 0,146 | 0,131 |
| 1,015 | | 2,058 | | 3,717 | | 0,116 | |
| 0,972 | | 2,325 | | 3,932 | | | |
| | | | | 4,040 | | | |
| | | | | 4,037 | | | |

Tabelle 8.201: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,6 Mol% Heptanal und 49,4 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Heptanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|----------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 0,473 | 0,470 | 1,0 | 1,023 | 1,726 | 1,828 | 0,069 | 0,065 |
| 0,483 | | 0,962 | | 1,714 | | 0,0613 | |
| 0,455 | | 1,106 | | 1,860 | | | |
| | | | | 1,933 | | | |
| | | | | 1,909 | | | |

Tabelle 8.202: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 57,7 Mol% Heptanal und 40,1 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Heptanal

| Heptanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | 1,005 | 0,531 | 0,538 | 1,665 | 1,846 | 0,145 | 0,139 | 0,061 | 0,067 |
| 1,010 | | 0,568 | | 1,910 | | 0,131 | | 0,061 | |
| 1,005 | | 0,516 | | 2,060 | | 0,132 | | 0,074 | |
| | | | | 1,819 | | 0,152 | | 0,071 | |
| | | | | 1,778 | | 0,138 | | 0,071 | |

Tabelle 8.203: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 57,7 Mol% Heptanal und 40,1 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Heptanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|----------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,904 | 1,910 | 1,0 | 1,012 | 3,129 | 3,490 | 0,270 | 0,264 | 0,118 | 0,118 |
| 1,916 | | 1,057 | | 3,624 | | 0,248 | | 0,108 | |
| 1,908 | | 0,979 | | 3,900 | | 0,251 | | 0,121 | |
| | | | | 3,417 | | 0,272 | | 0,126 | |
| | | | | 3,379 | | 0,277 | | 0,117 | |

255 K

Tabelle 8.204: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,6 Mol% Heptanal und 49,4 Mol% 1-Propanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Heptanal

| Heptanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|----------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,0 | 0,922 | 2,262 | 2,298 | 7,775 | 7,918 | 0,457 | 0,412 |
| 0,848 | | 2,270 | | 7,584 | | 0,382 | |
| 0,918 | | 2,362 | | 8,170 | | 0,396 | |
| | | | | 8,141 | | | |

Tabelle 8.205: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,6 Mol% Heptanal und 49,4 Mol% 1-Propanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Heptanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|----------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_H | \bar{A}_H | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 0,461 | 0,419 | 1,0 | 1,038 | 3,547 | 3,698 | 0,214 | 0,206 |
| 0,380 | | 1,027 | | 3,460 | | 0,198 | |
| 0,414 | | 1,089 | | 3,970 | | 0,208 | |
| | | | | 3,815 | | | |

8.1.3.13 Decanal + Methanol

295 K

Tabelle 8.206: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 19,6 Mol% Decanal und 80,0 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Decanal

| Decanal | | Methanol | | HA 1 | |
|---------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | 0,916 | 19,884 | 19,884 | 6,404 | 6,496 |
| 0,786 | | | | 6,415 | |
| 0,961 | | | | 6,668 | |

Tabelle 8.207: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 19,6 Mol% Decanal und 80,0 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Decanal | | Methanol | | HA 1 | |
|---------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,047 | 0,044 | 1,0 | 1,0 | 0,318 | 0,325 |
| 0,039 | | | | 0,320 | |
| 0,047 | | | | 0,337 | |

Tabelle 8.208: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 39,1 Mol% Decanal und 60,1 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Decanal

| Decanal | | Methanol | | HA 1 | |
|---------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | 1,003 | 3,111 | 3,111 | 3,486 | 3,563 |
| 0,932 | | | | 3,534 | |
| 1,077 | | | | 3,670 | |

Tabelle 8.209: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 39,1 Mol% Decanal und 60,1 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Decanal | | Methanol | | HA 1 | |
|---------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,321 | 0,326 | 1,0 | 1,0 | 1,110 | 1,138 |
| 0,300 | | | | 1,138 | |
| 0,358 | | | | 1,166 | |

Tabelle 8.210: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,1 Mol% Decanal und 49,9 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Decanal

| Decanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|---------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,0 | 0,975 | 1,283 | 1,283 | 2,088 | 2,124 | 0,034 | 0,037 |
| 0,932 | | | | 2,131 | | 0,041 | |
| 0,995 | | | | 2,153 | | 0,036 | |

Tabelle 8.211: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,1 Mol% Decanal und 49,9 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Decanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|---------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 0,774 | 0,755 | 1,0 | 1,0 | 1,615 | 1,640 | 0,028 | 0,031 |
| 0,718 | | | | 1,638 | | 0,035 | |
| 0,773 | | | | 1,666 | | 0,029 | |

Tabelle 8.212: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,8 Mol% Decanal und 40,0 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Decanal

| Decanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|---------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,0 | 0,977 | 0,335 | 0,335 | 0,979 | 1,003 | 0,032 | 0,031 |
| 0,920 | | | | 0,984 | | 0,030 | |
| 1,010 | | | | 1,045 | | 0,029 | |
| | | | | | | 0,034 | |

Tabelle 8.213: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,8 Mol% Decanal und 40,0 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Decanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|---------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 2,970 | 2,880 | 1,0 | 1,0 | 2,892 | 2,965 | 0,111 | 0,103 |
| 2,690 | | | | 2,918 | | 0,093 | |
| 2,982 | | | | 3,086 | | 0,092 | |
| | | | | | | 0,116 | |

Tabelle 8.214: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 78,6 Mol% Decanal und 19,8 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Decanal

| Decanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|---------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,0 | 0,960 | 0,037 | 0,037 | 0,241 | 0,253 | 0,017 | 0,017 |
| 0,904 | | | | 0,242 | | 0,018 | |
| 0,976 | | | | 0,276 | | 0,013 | |
| | | | | | | 0,021 | |

Tabelle 8.215: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 78,6 Mol% Decanal und 19,8 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| Decanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|---------|-------------|----------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 27,801 | 26,746 | 1,0 | 1,0 | 6,699 | 6,932 | 0,477 | 0,482 |
| 24,978 | | | | 6,710 | | 0,489 | |
| 27,459 | | | | 7,386 | | 0,409 | |
| | | | | | | 0,553 | |

273 K

Proben gefroren

8.1.3.14 Decanal + Ethanol**295 K**Tabelle 8.216: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 20,0 Mol% Decanal und 80,0 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Decanal

| Decanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|---------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | 0,951 | 13,413 | 13,396 | 3,352 | 3,294 |
| 0,881 | | 13,378 | | 3,123 | |
| 0,972 | | | | 3,500 | |
| | | | | 3,330 | |
| | | | | 3,168 | |

Tabelle 8.217: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 20,0 Mol% Decanal und 80,0 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Decanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|---------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,075 | 0,071 | 1,0 | 1,0 | 0,250 | 0,248 |
| 0,065 | | 1,0 | | 0,230 | |
| 0,073 | | | | 0,265 | |
| | | | | 0,257 | |
| | | | | 0,238 | |

Tabelle 8.218: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 40,2 Mol% Decanal und 59,8 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Decanal

| Decanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|---------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | 1,0 | 2,040 | 2,055 | 1,492 | 1,478 |
| | | 2,069 | | 1,430 | |
| | | | | 1,545 | |
| | | | | 1,503 | |
| | | | | 1,419 | |

Tabelle 8.219: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 40,2 Mol% Decanal und 59,8 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Decanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|---------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,487 | 0,463 | 1,0 | 1,009 | 0,726 | 0,722 |
| 0,420 | | 1,018 | | 0,698 | |
| 0,482 | | | | 0,752 | |
| | | | | 0,741 | |
| | | | | 0,692 | |

Tabelle 8.220: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 50,0 Mol% Decanal und 50,0 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Decanal

| Decanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|---------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,0 | 0,983 | 1,040 | 1,027 | 1,015 | 1,021 | 0,038 | 0,029 |
| 0,946 | | 1,013 | | 1,041 | | 0,022 | |
| 1,003 | | | | 1,008 | | 0,026 | |

Tabelle 8.221: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 50,0 Mol% Decanal und 50,0 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Decanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|---------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 0,977 | 0,967 | 1,0 | 0,995 | 1,008 | 1,012 | 0,038 | 0,029 |
| 0,934 | | 0,991 | | 1,031 | | 0,022 | |
| 0,989 | | | | 0,997 | | 0,026 | |

Tabelle 8.222: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 60,3 Mol% Decanal und 39,7 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Decanal

| Decanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|---------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,0 | 0,983 | 0,506 | 0,509 | 0,677 | 0,683 | 0,024 | 0,025 |
| 0,936 | | 0,513 | | 0,652 | | 0,024 | |
| 1,013 | | | | 0,706 | | 0,026 | |
| | | | | 0,721 | | | |
| | | | | 0,660 | | | |

Tabelle 8.223: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 60,3 Mol% Decanal und 39,7 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Decanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|---------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 2,028 | 1,966 | 1,0 | 1,013 | 1,375 | 1,363 | 0,049 | 0,050 |
| 1,851 | | 1,026 | | 1,268 | | 0,049 | |
| 2,019 | | | | 1,417 | | 0,052 | |
| | | | | 1,426 | | | |
| | | | | 1,329 | | | |

Tabelle 8.224: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 79,4 Mol% Decanal und 20,6 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Decanal

| Decanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|---------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | 0,950 | 0,080 | 0,080 | 0,186 | 0,195 |
| 0,877 | | 0,081 | | 0,177 | |
| 0,973 | | | | 0,221 | |
| | | | | 0,207 | |
| | | | | 0,185 | |

Tabelle 8.225: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 79,4 Mol% Decanal und 20,6 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Decanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|---------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 12,452 | 11,907 | 1,0 | 1,007 | 2,331 | 2,451 |
| 11,096 | | 1,014 | | 2,219 | |
| 12,172 | | | | 2,759 | |
| | | | | 2,640 | |
| | | | | 2,305 | |

273 K

Tabelle 8.226: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 40,2 Mol% Decanal und 59,8 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Decanal

| Decanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|---------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | 0,922 | 4,526 | 4,554 | 5,288 | 5,318 |
| 0,874 | | 4,581 | | 5,289 | |
| 0,891 | | | | 5,140 | |
| | | | | 5,472 | |
| | | | | 5,400 | |

Tabelle 8.227: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 40,2 Mol% Decanal und 59,8 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Decanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|---------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,219 | 0,201 | 1,0 | 1,006 | 1,168 | 1,185 |
| 0,190 | | 1,011 | | 1,167 | |
| 0,195 | | | | 1,178 | |
| | | | | 1,210 | |
| | | | | 1,205 | |

Tabelle 8.228: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 50,0 Mol% Decanal und 50,0 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Decanal

| Decanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|---------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | 0,974 | 1,338 | 1,375 | 3,047 | 3,194 |
| 0,942 | | 1,412 | | 3,013 | |
| 0,981 | | | | 3,167 | |
| | | | | 3,453 | |
| | | | | 3,290 | |

Tabelle 8.229: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 50,0 Mol% Decanal und 50,0 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Decanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|---------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,738 | 0,722 | 1,0 | 1,034 | 2,242 | 2,382 |
| 0,699 | | 1,068 | | 2,229 | |
| 0,729 | | | | 2,468 | |
| | | | | 2,523 | |
| | | | | 2,447 | |

Tabelle 8.230: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 60,3 Mol% Decanal und 39,7 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Decanal

| Decanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|---------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,0 | 0,939 | 0,336 | 0,335 | 1,352 | 1,364 | 0,097 | 0,097 |
| 0,899 | | 0,334 | | 1,258 | | 0,089 | |
| 0,917 | | | | 1,383 | | 0,106 | |
| | | | | 1,442 | | | |
| | | | | 1,386 | | | |

Tabelle 8.231: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 60,3 Mol% Decanal und 39,7 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| Decanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|---------|-------------|---------|-------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 2,965 | 2,797 | 1,0 | 0,999 | 4,004 | 4,054 | 0,312 | 0,308 |
| 2,677 | | 0,998 | | 3,746 | | 0,255 | |
| 2,748 | | | | 4,117 | | 0,357 | |
| | | | | 4,293 | | | |
| | | | | 4,112 | | | |

255 K

Proben gefroren

8.1.3.15 Decanal + 1-Propanol

295 K

Tabelle 8.232: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 39,3 Mol% Decanal und 59,3 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Decanal

| Decanal | | 1-Propanol | | HA 1 | |
|---------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | 0,928 | 1,791 | 1,830 | 1,370 | 1,370 |
| 0,872 | | 1,953 | | 1,231 | |
| 0,913 | | 1,746 | | 1,419 | |
| | | | | 1,442 | |
| | | | | 1,426 | |
| | | | | 1,330 | |

Tabelle 8.233: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 39,3 Mol% Decanal und 59,3 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Decanal | | 1-Propanol | | HA 1 | |
|---------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,557 | 0,517 | 1,0 | 1,022 | 0,771 | 0,764 |
| 0,491 | | 1,094 | | 0,699 | |
| 0,502 | | 0,973 | | 0,785 | |
| | | | | 0,799 | |
| | | | | 0,786 | |
| | | | | 0,745 | |

Tabelle 8.234: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,3 Mol% Decanal und 50,2 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Decanal

| Decanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|---------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,0 | 0,974 | 1,108 | 1,133 | 1,062 | 1,053 | 0,036 | 0,033 |
| 0,927 | | 1,199 | | 1,016 | | 0,033 | |
| 0,994 | | 1,091 | | 1,108 | | 0,029 | |
| | | | | 1,026 | | | |

Tabelle 8.235: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,3 Mol% Decanal und 50,2 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Decanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|---------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 0,874 | 0,860 | 1,0 | 1,027 | 0,958 | 0,957 | 0,032 | 0,028 |
| 0,836 | | 1,091 | | 0,909 | | 0,028 | |
| 0,870 | | 0,990 | | 1,005 | | 0,024 | |
| | | | | 0,955 | | | |

Tabelle 8.236: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,8 Mol% Decanal und 39,6 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Decanal

| Decanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|---------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,0 | 0,954 | 0,474 | 0,485 | 0,680 | 0,667 | 0,020 | 0,025 |
| 0,890 | | 0,523 | | 0,626 | | 0,032 | |
| 0,972 | | 0,459 | | 0,662 | | 0,022 | |
| | | | | 0,694 | | | |
| | | | | 0,671 | | | |

Tabelle 8.237: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,8 Mol% Decanal und 39,6 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Decanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|---------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 2,093 | 1,988 | 1,0 | 1,018 | 1,414 | 1,383 | 0,040 | 0,049 |
| 1,841 | | 1,092 | | 1,308 | | 0,060 | |
| 2,030 | | 0,963 | | 1,381 | | 0,047 | |
| | | | | 1,449 | | | |
| | | | | 1,365 | | | |

273 KTabelle 8.238: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 39,3 Mol% Decanal und 59,3 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Decanal

| Decanal | | 1-Propanol | | HA 1 | |
|---------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | 0,926 | 4,931 | 5,134 | 5,696 | 5,961 |
| 0,864 | | 5,101 | | 5,727 | |
| 0,913 | | 5,369 | | 6,066 | |
| | | | | 6,178 | |
| | | | | 6,137 | |

Tabelle 8.239: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 39,3 Mol% Decanal und 59,3 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Decanal | | 1-Propanol | | HA 1 | |
|---------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,203 | 0,190 | 1,0 | 1,048 | 1,142 | 1,209 |
| 0,175 | | 1,049 | | 1,181 | |
| 0,191 | | 1,094 | | 1,230 | |
| | | | | 1,236 | |
| | | | | 1,255 | |

Tabelle 8.240: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,3 Mol% Decanal und 50,2 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Decanal

| Decanal | | 1-Propanol | | HA 1 | |
|---------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | 0,997 | 1,546 | 1,627 | 3,085 | 3,340 |
| 0,978 | | 1,634 | | 3,183 | |
| 1,014 | | 1,701 | | 3,370 | |
| | | | | 3,568 | |
| | | | | 3,492 | |

Tabelle 8.241: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,3 Mol% Decanal und 50,2 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Decanal | | 1-Propanol | | HA 1 | |
|---------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,602 | 0,606 | 1,0 | 1,021 | 1,8981 | 2,037 |
| 0,601 | | 1,010 | | 1,940 | |
| 0,613 | | 1,052 | | 2,032 | |
| | | | | 2,152 | |
| | | | | 2,160 | |

Tabelle 8.242: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,8 Mol% Decanal und 39,6 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Decanal

| Decanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | 0,998 | 0,368 | 0,390 | 1,374 | 1,517 | 0,129 | 0,117 | 0,0707 | 0,064 |
| 0,966 | | 0,385 | | 1,407 | | 0,109 | | 0,065 | |
| 1,026 | | 0,419 | | 1,593 | | 0,111 | | 0,0688 | |
| | | | | 1,666 | | 0,120 | | 0,0524 | |
| | | | | 1,547 | | | | | |

Tabelle 8.243: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,8 Mol% Decanal und 39,6 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| Decanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|---------|-------------|------------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|-----------|-----------------|
| A_D | \bar{A}_D | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 2,707 | 2,685 | 1,0 | 1,049 | 3,717 | 4,122 | 0,330 | 0,318 | 0,189 | 0,179 |
| 2,614 | | 1,016 | | 3,814 | | 0,326 | | 0,171 | |
| 2,735 | | 1,131 | | 4,360 | | 0,296 | | 0,178 | |
| | | | | 4,533 | | | | | |
| | | | | 4,185 | | | | | |

255 K

Proben gefroren

8.1.3.16 2-Chlorbenzaldehyd + Methanol

295 K

Tabelle 8.244: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 23,9 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 75,6 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Methanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|----------------------------|----------|-------------|----------|-----------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_M | \bar{A}_M | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,05 \pm_{0,045}^{0,048}$ | 5,31 | 5,31 | 1,765 | $1,67 \pm 0,01$ | 0,340 | $0,331 \pm_{0,037}^{0,018}$ |
| 1,093 | | | | 1,695 | | 0,349 | |
| 1,078 | | | | | | 0,335 | |
| 1,054 | | | | 1,761 | | 0,335 | |
| 1,000 | | | | 1,689 | | 0,331 | |
| | | | | 1,651 | | 0,294 | |
| | | | | 3,112 | | | |

Tabelle 8.245: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 23,9 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 75,6 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Methanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|------------------|----------|-------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_M | \bar{A}_M | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,189 | $0,197 \pm 0,01$ | 1,0 | 1,0 | 0,336 | $0,315 \pm_{0,022}^{0,021}$ | 0,064 | $0,062 \pm_{0,007}^{0,004}$ |
| 0,207 | | | | 0,318 | | 0,066 | |
| 0,204 | | | | 0,333 | | 0,061 | |
| 0,199 | | | | 0,319 | | 0,062 | |
| 0,187 | | | | 0,312 | | 0,062 | |
| | | | | 0,585 | | 0,055 | |

Tabelle 8.246: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 39,1 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 60,1 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Methanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|----------------------------|----------|-------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_M | \bar{A}_M | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,01 \pm_{0,025}^{0,029}$ | 1,05 | 1,05 | 0,780 | $0,734 \pm_{0,023}^{0,046}$ | 0,149 | $0,151 \pm_{0,007}^{0,009}$ |
| 1,035 | | | | 0,754 | | 0,144 | |
| 0,982 | | | | 0,747 | | 0,146 | |
| 1,036 | | | | 0,721 | | 0,159 | |
| 0,982 | | | | 0,702 | | 0,155 | |
| | | | | 0,713 | | | |
| | | | | 1,457 | | | |

Tabelle 8.247: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 39,1 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 60,1 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Methanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|------------------|----------|-------------|----------|--|-----------|--|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_M | \bar{A}_M | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,956 | $0,959 \pm 0,03$ | 1,0 | 1,0 | 0,746 | $0,701 \pm \begin{smallmatrix} 0,045 \\ 0,032 \end{smallmatrix}$ | 0,142 | $0,143 \pm \begin{smallmatrix} 0,005 \\ 0,004 \end{smallmatrix}$ |
| 0,987 | | | | 0,727 | | 0,140 | |
| 0,930 | | | | 0,714 | | 0,138 | |
| 0,992 | | | | 0,689 | | 0,147 | |
| 0,932 | | | | 0,670 | | 0,146 | |
| | | | | 0,675 | | | |
| | | | | 1,391 | | | |

Tabelle 8.248: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,8 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 50,2 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Methanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|-----------------|----------|-------------|----------|--|-----------|--|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_M | \bar{A}_M | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,04 \pm 0,04$ | 0,481 | 0,481 | 0,467 | $0,423 \pm \begin{smallmatrix} 0,044 \\ 0,031 \end{smallmatrix}$ | 0,110 | $0,110 \pm \begin{smallmatrix} 0,008 \\ 0,006 \end{smallmatrix}$ |
| 1,080 | | | | 0,451 | | 0,118 | |
| 1,043 | | | | 0,425 | | 0,111 | |
| 1,052 | | | | 0,441 | | 0,104 | |
| 1,018 | | | | 0,410 | | 0,106 | |
| | | | | 0,405 | | | |
| | | | | 0,785 | | | |

Tabelle 8.249: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,8 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 50,2 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Methanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|---|----------|-------------|----------|--|-----------|--|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_M | \bar{A}_M | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 2,072 | $2,16 \pm \begin{smallmatrix} 0,08 \\ 0,09 \end{smallmatrix}$ | 1,0 | 1,0 | 0,959 | $0,874 \pm \begin{smallmatrix} 0,085 \\ 0,069 \end{smallmatrix}$ | 0,230 | $0,224 \pm \begin{smallmatrix} 0,016 \\ 0,009 \end{smallmatrix}$ |
| 2,235 | | | | 0,938 | | 0,241 | |
| 2,183 | | | | 0,872 | | 0,219 | |
| 2,185 | | | | 0,922 | | 0,216 | |
| 2,113 | | | | 0,850 | | 0,218 | |
| | | | | 0,842 | | | |
| | | | | 1,611 | | | |

Tabelle 8.250: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,9 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 40,0 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Methanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|----------|-------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_M | \bar{A}_M | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,01 \pm_{0,04}^{0,08}$ | 0,455 | 0,455 | 0,139 | $0,119 \pm_{0,012}^{0,019}$ | 0,121 | $0,122 \pm_{0,002}^{0,003}$ |
| 1,033 | | | | 0,121 | | 0,125 | |
| 0,977 | | | | 0,131 | | 0,125 | |
| 1,029 | | | | 0,119 | | 0,120 | |
| 0,981 | | | | 0,116 | | 0,122 | |
| 0,970 | | | | 0,115 | | 0,120 | |
| 1,087 | | | | 0,215 | | | |

Tabelle 8.251: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,9 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 40,0 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Methanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|----------|-------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_M | \bar{A}_M | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 2,208 | $2,24 \pm_{0,09}^{0,18}$ | 1,0 | 1,0 | 0,306 | $0,265 \pm_{0,030}^{0,044}$ | 0,270 | $0,272 \pm_{0,008}^{0,012}$ |
| 2,295 | | | | 0,267 | | 0,278 | |
| 2,156 | | | | 0,309 | | 0,284 | |
| 2,263 | | | | 0,262 | | 0,265 | |
| 2,174 | | | | 0,253 | | 0,270 | |
| 2,142 | | | | 0,254 | | 0,264 | |
| 2,413 | | | | 0,471 | | | |

Tabelle 8.252: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 72,2 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 26,3 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Methanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|----------|-------------|----------|------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_M | \bar{A}_M | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,04 \pm_{0,06}^{0,04}$ | 0,152 | 0,152 | 0,096 | 0,086 \pm 0,01 | 0,066 | $0,062 \pm_{0,006}^{0,008}$ |
| 1,083 | | | | 0,095 | | 0,070 | |
| 1,072 | | | | 0,086 | | 0,063 | |
| 1,060 | | | | 0,094 | | 0,056 | |
| 0,984 | | | | 0,077 | | 0,061 | |
| 1,044 | | | | 0,086 | | 0,058 | |
| 1,068 | | | | 0,157 | | | |

Tabelle 8.253: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 72,2 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 26,3 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Methanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|----------|-------------|----------|---------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_M | \bar{A}_M | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 6,595 | $6,91 \pm_{0,40}^{0,22}$ | 1,0 | 1,0 | 0,654 | $0,578 \pm_{0,06}^{0,08}$ | 0,425 | $0,407 \pm_{0,036}^{0,063}$ |
| 7,116 | | | | 0,626 | | 0,470 | |
| 7,079 | | | | 0,577 | | 0,389 | |
| 6,973 | | | | 0,632 | | 0,370 | |
| 6,507 | | | | 0,519 | | 0,403 | |
| 6,945 | | | | 0,567 | | 0,385 | |
| 7,128 | | | | 1,049 | | | |

273 KTabelle 8.254: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 39,8 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 59,9 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Methanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|----------|-------------|----------|---------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_M | \bar{A}_M | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,06 \pm_{0,06}^{0,05}$ | 0,860 | 0,860 | 0,967 | $0,887 \pm_{0,07}^{0,08}$ | 0,350 | $0,321 \pm_{0,034}^{0,035}$ |
| 1,102 | | | | 0,871 | | 0,341 | |
| 1,087 | | | | 0,938 | | 0,356 | |
| 1,005 | | | | 0,941 | | 0,294 | |
| 1,109 | | | | 0,848 | | 0,298 | |
| | | | | 0,897 | | 0,287 | |
| | | | | 1,633 | | | |

Tabelle 8.255: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 39,8 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 59,9 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Methanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|----------|-------------|----------|----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_M | \bar{A}_M | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,164 | $1,23 \pm_{0,07}^{0,06}$ | 1,0 | 1,0 | 1,126 | $1,02 \pm_{0,073}^{0,075}$ | 0,353 | $0,365 \pm_{0,042}^{0,046}$ |
| 1,295 | | | | 0,985 | | 0,408 | |
| 1,269 | | | | 1,093 | | 0,386 | |
| 1,165 | | | | 1,098 | | 0,411 | |
| 1,274 | | | | 0,957 | | 0,327 | |
| | | | | 1,026 | | 0,345 | |
| | | | | 1,899 | | 0,322 | |

Tabelle 8.256: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,1 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 49,4 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Methanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|----------------------------|----------|-------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_M | \bar{A}_M | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,06 \pm_{0,085}^{0,054}$ | 0,351 | 0,351 | 0,553 | $0,498 \pm_{0,028}^{0,055}$ | 0,183 | $0,184 \pm_{0,018}^{0,026}$ |
| 1,115 | | | | 0,471 | | 0,210 | |
| 1,109 | | | | 0,532 | | 0,194 | |
| 0,975 | | | | 0,486 | | 0,177 | |
| 1,103 | | | | 0,506 | | 0,173 | |
| | | | | 0,940 | | 0,165 | |

Tabelle 8.257: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,1 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 49,4 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Methanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|----------|-------------|----------|--------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_M | \bar{A}_M | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 3,028 | $3,19 \pm_{0,28}^{0,16}$ | 1,0 | 1,0 | 1,658 | $1,50 \pm_{0,09}^{0,16}$ | 0,551 | $0,550 \pm_{0,056}^{0,071}$ |
| 3,352 | | | | 1,417 | | 0,621 | |
| 3,347 | | | | 1,604 | | 0,603 | |
| 2,908 | | | | 1,476 | | 0,517 | |
| 3,323 | | | | 1,520 | | 0,515 | |
| | | | | 2,825 | | 0,494 | |

Tabelle 8.258: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,8 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 40,0 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Methanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|----------|-------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_M | \bar{A}_M | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,04 \pm_{0,04}^{0,05}$ | 0,285 | 0,285 | 0,234 | $0,221 \pm_{0,020}^{0,013}$ | 0,189 | $0,175 \pm_{0,015}^{0,014}$ |
| 1,086 | | | | 0,233 | | 0,182 | |
| 0,997 | | | | 0,216 | | 0,181 | |
| 1,081 | | | | 0,233 | | 0,171 | |
| 1,025 | | | | 0,201 | | 0,167 | |
| 1,025 | | | | 0,431 | | 0,161 | |
| | | | | | | | |

Tabelle 8.259: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,8 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 40,0 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Methanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|----------|-------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_M | \bar{A}_M | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 3,506 | $3,63 \pm_{0,13}^{0,17}$ | 1,0 | 1,0 | 0,824 | $0,776 \pm_{0,072}^{0,048}$ | 0,656 | $0,614 \pm_{0,061}^{0,042}$ |
| 3,793 | | | | 0,811 | | 0,634 | |
| 3,496 | | | | 0,781 | | 0,654 | |
| 3,797 | | | | 0,805 | | 0,601 | |
| 3,615 | | | | 0,704 | | 0,585 | |
| 3,570 | | | | 1,506 | | 0,553 | |

255 KTabelle 8.260: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,1 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 49,4 Mol% Methanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Methanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|----------|-------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_M | \bar{A}_M | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,05 \pm_{0,09}^{0,07}$ | 0,152 | 0,152 | 0,754 | $0,676 \pm_{0,041}^{0,078}$ | 0,184 | $0,175 \pm_{0,015}^{0,011}$ |
| 1,085 | | | | 0,672 | | 0,186 | |
| 1,124 | | | | 0,715 | | 0,178 | |
| 0,966 | | | | 0,635 | | 0,169 | |
| 1,095 | | | | 0,705 | | 0,172 | |
| | | | | 1,251 | | 0,160 | |

Tabelle 8.261: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,1 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 49,4 Mol% Methanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Methanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|----------|-------------|----------|--------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_M | \bar{A}_M | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 6,465 | $6,89 \pm_{0,53}^{0,48}$ | 1,0 | 1,0 | 4,966 | $4,44 \pm_{0,32}^{0,52}$ | 1,210 | $1,139 \pm_{0,095}^{0,071}$ |
| 7,114 | | | | 4,350 | | 1,201 | |
| 7,361 | | | | 4,716 | | 1,145 | |
| 6,353 | | | | 4,244 | | 1,108 | |
| 7,130 | | | | 4,570 | | 1,125 | |
| | | | | 8,243 | | 1,044 | |

8.1.3.17 2-Chlorbenzaldehyd + Ethanol

295 K

Tabelle 8.262: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 10,2 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 87,7 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Ethanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|---------|------------------|----------|--------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_E | \bar{A}_E | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,03 \pm_{0,03}^{0,04}$ | 22,832 | $22,63 \pm 0,20$ | 2,115 | $2,04 \pm_{0,13}^{0,18}$ | 0,354 | $0,332 \pm_{0,054}^{0,034}$ |
| 1,068 | | 22,437 | | 2,153 | | 0,366 | |
| 1,005 | | | | 2,158 | | 0,359 | |
| 1,064 | | | | 2,218 | | 0,278 | |
| 0,998 | | | | 1,997 | | 0,319 | |
| 1,040 | | | | 2,082 | | 0,288 | |
| | | | | 3,823 | | 0,361 | |
| | | | | 3,867 | | | |

Tabelle 8.263: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 10,2 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 87,7 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Ethanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|-----------------------------|---------|-----------------|----------|-----------------------------|-----------|-------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_E | \bar{A}_E | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,044 | $0,045 \pm_{0,001}^{0,002}$ | 1,0 | $0,99 \pm 0,01$ | 0,093 | $0,089 \pm_{0,006}^{0,008}$ | 0,015 | $0,014 \pm 0,002$ |
| 0,047 | | 0,981 | | 0,095 | | 0,016 | |
| 0,044 | | | | 0,095 | | 0,016 | |
| 0,047 | | | | 0,097 | | 0,012 | |
| 0,044 | | | | 0,083 | | 0,014 | |
| 0,044 | | | | 0,091 | | 0,012 | |
| | | | | 0,166 | | 0,016 | |
| | | | | 0,169 | | | |

Tabelle 8.264: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 23,8 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 74,0 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Ethanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|---------|-----------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_E | \bar{A}_E | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,05 \pm_{0,05}^{0,03}$ | 3,901 | $4,06 \pm 0,16$ | 0,781 | $0,763 \pm_{0,037}^{0,070}$ | 0,195 | $0,186 \pm_{0,020}^{0,011}$ |
| 1,084 | | 4,212 | | 0,833 | | 0,197 | |
| 1,049 | | | | 0,777 | | 0,167 | |
| 1,080 | | | | 0,802 | | 0,174 | |
| | | | | 0,759 | | 0,198 | |
| | | | | 1,453 | | | |
| | | | | 1,464 | | | |

Tabelle 8.265: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 23,8 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 74,0 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Ethanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|-----------------------------|---------|-----------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_E | \bar{A}_E | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,259 | $0,273 \pm_{0,014}^{0,009}$ | 1,0 | $1,05 \pm 0,05$ | 0,202 | $0,200 \pm_{0,012}^{0,013}$ | 0,050 | $0,048 \pm_{0,007}^{0,004}$ |
| 0,281 | | 1,095 | | 0,213 | | 0,052 | |
| 0,273 | | | | 0,206 | | 0,042 | |
| 0,278 | | | | 0,196 | | 0,046 | |
| | | | | 0,376 | | 0,052 | |
| | | | | 0,409 | | | |

Tabelle 8.266: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,8 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 47,7 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Ethanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|---------|------------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_E | \bar{A}_E | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,05 \pm_{0,05}^{0,04}$ | 0,669 | $0,698 \pm 0,03$ | 0,232 | $0,214 \pm_{0,019}^{0,018}$ | 0,087 | $0,082 \pm_{0,008}^{0,006}$ |
| 1,088 | | 0,727 | | 0,226 | | 0,086 | |
| 1,053 | | | | 0,213 | | 0,082 | |
| 1,068 | | | | 0,214 | | 0,081 | |
| 1,027 | | | | 0,225 | | 0,074 | |
| | | | | 0,195 | | 0,076 | |
| | | | | 0,205 | | 0,085 | |
| | | | | 0,412 | | | |
| | | | | 0,433 | | | |

Tabelle 8.267: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,8 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 47,7 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Ethanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|---------|-----------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_E | \bar{A}_E | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,488 | $1,56 \pm_{0,08}^{0,07}$ | 1,0 | $1,04 \pm 0,04$ | 0,347 | $0,319 \pm_{0,021}^{0,028}$ | 0,130 | $0,123 \pm_{0,011}^{0,010}$ |
| 1,628 | | 1,079 | | 0,339 | | 0,131 | |
| 1,560 | | | | 0,316 | | 0,132 | |
| 1,594 | | | | 0,319 | | 0,117 | |
| 1,546 | | | | 0,335 | | 0,112 | |
| | | | | 0,298 | | 0,113 | |
| | | | | 0,306 | | 0,124 | |
| | | | | 0,614 | | | |
| | | | | 0,637 | | | |

Tabelle 8.268: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 71,1 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 26,2 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Ethanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|---------|-------------------|----------|-----------------------------|-----------|-------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_E | \bar{A}_E | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,06 \pm_{0,06}^{0,02}$ | 0,172 | $0,176 \pm 0,004$ | 0,100 | $0,095 \pm_{0,008}^{0,006}$ | 0,036 | $0,035 \pm 0,003$ |
| 1,081 | | 0,180 | | 0,101 | | 0,038 | |
| 1,045 | | | | 0,097 | | 0,032 | |
| 1,142 | | | | 0,097 | | 0,036 | |
| 1,042 | | | | 0,087 | | 0,033 | |
| | | | | 0,093 | | 0,034 | |
| | | | | 0,187 | | | |
| | | | | 0,191 | | | |

Tabelle 8.269: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 71,1 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 26,2 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Ethanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|---------|-----------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_E | \bar{A}_E | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 5,778 | $6,20 \pm_{0,42}^{0,46}$ | 1,0 | $1,02 \pm 0,02$ | 0,577 | $0,551 \pm_{0,056}^{0,034}$ | 0,217 | $0,166 \pm_{0,029}^{0,051}$ |
| 6,309 | | 1,041 | | 0,585 | | 0,215 | |
| 6,027 | | | | 0,542 | | 0,203 | |
| 6,654 | | | | 0,568 | | 0,195 | |
| 6,213 | | | | 0,496 | | 0,200 | |
| | | | | 0,539 | | | |
| | | | | 1,093 | | | |
| | | | | 1,116 | | | |

Tabelle 8.270: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 87,3 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 9,8 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Ethanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|---------|-------------|----------|-------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_E | \bar{A}_E | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,05 \pm_{0,05}^{0,04}$ | 0,033 | 0,0334 | 0,032 | $0,030 \pm 0,003$ | 0,010 | $0,009 \pm_{0,002}^{0,001}$ |
| 1,088 | | 0,033 | | 0,032 | | 0,007 | |
| 1,065 | | | | 0,030 | | 0,009 | |
| 1,123 | | | | 0,031 | | 0,009 | |
| 1,029 | | | | 0,027 | | | |
| 1,034 | | | | 0,027 | | | |
| 1,022 | | | | 0,057 | | | |
| | | | | 0,060 | | | |

Tabelle 8.271: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 87,3 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 9,8 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Ethanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|---------------------------|---------|-----------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_E | \bar{A}_E | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 29,838 | $31,26 \pm_{1,42}^{2,33}$ | 1,0 | $1,02 \pm 0,02$ | 0,956 | $0,881 \pm_{0,067}^{0,075}$ | 0,306 | $0,266 \pm_{0,050}^{0,039}$ |
| 32,747 | | 1,042 | | 0,937 | | 0,216 | |
| 31,156 | | | | 0,881 | | 0,271 | |
| 33,592 | | | | 0,876 | | 0,272 | |
| 30,624 | | | | 0,836 | | | |
| 30,534 | | | | 0,814 | | | |
| 30,315 | | | | 1,708 | | | |
| | | | | 1,803 | | | |

273 KTabelle 8.272: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 39,9 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 58,6 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Ethanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|---------|-----------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_E | \bar{A}_E | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,07 \pm_{0,07}^{0,06}$ | 1,268 | $1,32 \pm 0,05$ | 0,619 | $0,593 \pm_{0,055}^{0,038}$ | 0,212 | $0,209 \pm_{0,021}^{0,023}$ |
| 1,136 | | 1,366 | | 0,623 | | 0,223 | |
| 1,059 | | | | 0,564 | | 0,219 | |
| 1,110 | | | | 0,594 | | 0,194 | |
| 1,029 | | | | 0,538 | | 0,198 | |
| 1,106 | | | | 0,582 | | 0,188 | |
| | | | | 1,150 | | 0,232 | |
| | | | | 1,262 | | | |

Tabelle 8.273: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 39,9 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 58,6 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Ethanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|-----------------------------|---------|-----------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_E | \bar{A}_E | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,794 | $0,844 \pm_{0,074}^{0,058}$ | 1,0 | $1,04 \pm 0,04$ | 0,492 | $0,468 \pm_{0,045}^{0,027}$ | 0,171 | $0,163 \pm_{0,017}^{0,015}$ |
| 0,902 | | 1,079 | | 0,493 | | 0,178 | |
| 0,846 | | | | 0,446 | | 0,155 | |
| 0,878 | | | | 0,476 | | 0,158 | |
| 0,770 | | | | 0,423 | | 0,157 | |
| 0,874 | | | | 0,451 | | 0,146 | |
| | | | | 0,911 | | 0,176 | |
| | | | | 0,991 | | | |

Tabelle 8.274: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,5 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 49,0 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Ethanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|-----------------|---------|-------------|----------|--|-----------|--|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_E | \bar{A}_E | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | 1,05±0,05 | 0,629 | 0,65±0,026 | 0,368 | 0,352± ^{0,015} _{0,023} | 0,154 | 0,148± ^{0,015} _{0,014} |
| 1,082 | | 0,682 | | 0,367 | | 0,145 | |
| 1,023 | | | | 0,339 | | 0,151 | |
| 1,099 | | | | 0,365 | | 0,135 | |
| 1,003 | | | | 0,329 | | 0,145 | |
| 1,094 | | | | 0,344 | | 0,144 | |
| | | | | 0,679 | | 0,163 | |
| | | | | 0,733 | | | |

Tabelle 8.275: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,5 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 49,0 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Ethanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|---------------------------------------|---------|-------------|----------|--|-----------|--|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_E | \bar{A}_E | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,589 | 1,68± ^{0,08} _{0,09} | 1,0 | 1,04±0,04 | 0,600 | 0,564± ^{0,035} _{0,033} | 0,249 | 0,237± ^{0,016} _{0,012} |
| 1,738 | | 1,079 | | 0,589 | | 0,232 | |
| 1,631 | | | | 0,544 | | 0,234 | |
| 1,770 | | | | 0,575 | | 0,234 | |
| 1,593 | | | | 0,531 | | 0,233 | |
| 1,758 | | | | 0,550 | | 0,225 | |
| | | | | 1,087 | | 0,254 | |
| | | | | 1,170 | | | |

Tabelle 8.276: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,3 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 39,1 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Ethanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|---------------------------------------|---------|-------------|----------|--|-----------|-----------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_E | \bar{A}_E | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | 1,05± ^{0,04} _{0,05} | 0,285 | 0,295±0,01 | 0,239 | 0,226± ^{0,015} _{0,026} | 0,099 | 0,097±0,013 |
| 1,077 | | 0,304 | | 0,234 | | 0,101 | |
| 1,027 | | | | 0,217 | | 0,097 | |
| 1,085 | | | | 0,216 | | 0,110 | |
| 1,030 | | | | 0,199 | | 0,092 | |
| 1,053 | | | | 0,216 | | 0,092 | |
| | | | | 0,454 | | 0,084 | |
| | | | | 0,482 | | 0,101 | |

Tabelle 8.277: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,3 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 39,1 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Ethanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|---------|-----------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_E | \bar{A}_E | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 3,501 | $3,68 \pm_{0,18}^{0,13}$ | 1,0 | $1,04 \pm 0,04$ | 0,839 | $0,793 \pm_{0,073}^{0,046}$ | 0,347 | $0,346 \pm_{0,053}^{0,049}$ |
| 3,785 | | 1,074 | | 0,830 | | 0,353 | |
| 3,630 | | | | 0,749 | | 0,395 | |
| 3,809 | | | | 0,720 | | 0,384 | |
| 3,630 | | | | 0,746 | | 0,323 | |
| 3,744 | | | | 0,774 | | 0,324 | |
| | | | | 1,599 | | 0,293 | |
| | | | | 1,675 | | 0,352 | |

255 KTabelle 8.278: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,5 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 49,0 Mol% Ethanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Ethanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|-----------------|---------|-------------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_E | \bar{A}_E | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,07 \pm 0,07$ | 0,531 | $0,547 \pm 0,016$ | 0,473 | $0,432 \pm_{0,033}^{0,041}$ | 0,253 | $0,249 \pm_{0,021}^{0,020}$ |
| 1,134 | | 0,562 | | 0,461 | | 0,264 | |
| 1,037 | | | | 0,406 | | 0,269 | |
| 1,121 | | | | 0,437 | | 0,236 | |
| 1,001 | | | | 0,399 | | 0,233 | |
| 1,108 | | | | 0,419 | | 0,227 | |
| | | | | 0,830 | | 0,259 | |
| | | | | 0,893 | | | |

Tabelle 8.279: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,5 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 49,0 Mol% Ethanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| 2-Chlorbenzaldehyd | | Ethanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|---------|-----------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_E | \bar{A}_E | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,885 | $2,02 \pm_{0,11}^{0,13}$ | 1,0 | $1,03 \pm 0,03$ | 0,892 | $0,823 \pm_{0,066}^{0,069}$ | 0,482 | $0,470 \pm_{0,037}^{0,030}$ |
| 2,147 | | 1,054 | | 0,879 | | 0,501 | |
| 1,942 | | | | 0,785 | | 0,484 | |
| 2,133 | | | | 0,845 | | 0,461 | |
| 1,909 | | | | 0,757 | | 0,440 | |
| 2,118 | | | | 0,796 | | 0,433 | |
| | | | | 1,575 | | 0,491 | |
| | | | | 1,699 | | | |

8.1.3.18 2-Chlorbenzaldehyd + 1-Propanol

295 K

Tabelle 8.280: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 8,3 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 89,5 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$,
Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd

| 2-Chlorbenzaldehyd | | 1-Propanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|-----------------|------------|--|----------|--|-----------|--|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | 1,04±0,04 | 17,550 | 17,63± ^{0,40} _{0,32} | 0,420 | 0,387± ^{0,033} _{0,036} | 0,345 | 0,343± ^{0,042} _{0,025} |
| 1,041 | | 17,314 | | 0,411 | | 0,385 | |
| 1,062 | | 18,030 | | 0,409 | | 0,322 | |
| 1,079 | | | | 0,401 | | 0,342 | |
| 1,032 | | | | 0,360 | | 0,347 | |
| 1,026 | | | | 0,374 | | 0,318 | |
| | | | | 0,352 | | | |
| | | | | 0,788 | | | |
| | | | | 0,747 | | | |

Tabelle 8.281: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 8,3 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 89,5 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$,
Bezugsgröße 1-Propanol

| 2-Chlorbenzaldehyd | | 1-Propanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--|------------|---------------------------------------|----------|----------------|-----------|---|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,056 | 0,059± ^{0,002} _{0,001} | 1,0 | 1,01± ^{0,03} _{0,02} | 0,024 | 0,022±0,002 | 0,0197 | 0,0197± ^{0,001} _{0,002} |
| 0,059 | | 0,990 | | 0,023 | | 0,021 | |
| 0,061 | | 1,033 | | 0,023 | | 0,0201 | |
| 0,061 | | | | 0,023 | | 0,020 | |
| 0,059 | | | | 0,021 | | 0,020 | |
| 0,058 | | | | 0,021 | | 0,018 | |
| | | | | 0,020 | | | |
| | | | | 0,046 | | | |
| | | | | 0,043 | | | |

Tabelle 8.282: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 25,1 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 73,4 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$,
Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd

| 2-Chlorbenzaldehyd | | 1-Propanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|------------|--------------------------|----------|-----------------------------|-----------|---------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,06 \pm_{0,06}^{0,04}$ | 3,429 | $3,47 \pm_{0,04}^{0,09}$ | 0,465 | $0,423 \pm_{0,022}^{0,041}$ | 0,194 | $0,186 \pm_{0,021}$ |
| 1,102 | | 3,433 | | 0,448 | | 0,194 | |
| 1,085 | | 3,558 | | 0,424 | | 0,189 | |
| 1,087 | | | | 0,438 | | 0,166 | |
| 1,048 | | | | 0,435 | | 0,168 | |
| | | | | 0,414 | | 0,207 | |
| | | | | 0,411 | | | |
| | | | | 0,803 | | | |
| | | | | 0,820 | | | |

Tabelle 8.283: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 25,1 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 73,4 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$,
Bezugsgröße 1-Propanol

| 2-Chlorbenzaldehyd | | 1-Propanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|-----------------------------|------------|--------------------------|----------|-----------------------------|-----------|---------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,294 | $0,312 \pm_{0,018}^{0,012}$ | 1,0 | $1,02 \pm_{0,02}^{0,03}$ | 0,135 | $0,124 \pm_{0,005}^{0,011}$ | 0,057 | $0,053 \pm_{0,004}$ |
| 0,324 | | 1,003 | | 0,130 | | 0,057 | |
| 0,317 | | 1,050 | | 0,125 | | 0,049 | |
| 0,321 | | | | 0,127 | | 0,050 | |
| 0,306 | | | | 0,128 | | 0,049 | |
| | | | | 0,121 | | 0,056 | |
| | | | | 0,120 | | | |
| | | | | 0,238 | | | |
| | | | | 0,241 | | | |

Tabelle 8.284: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,6 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 49,4 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$,
Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd

| 2-Chlorbenzaldehyd | | 1-Propanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|------------|---------------------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,02 \pm_{0,02}^{0,06}$ | 0,761 | $0,781 \pm_{0,02}^{0,03}$ | 0,197 | $0,185 \pm_{0,012}^{0,016}$ | 0,088 | $0,086 \pm_{0,004}^{0,010}$ |
| 1,073 | | 0,771 | | 0,194 | | 0,096 | |
| 1,036 | | 0,811 | | 0,186 | | 0,084 | |
| 1,077 | | | | 0,201 | | 0,082 | |
| 1,030 | | | | 0,194 | | 0,084 | |
| 1,013 | | | | 0,173 | | 0,082 | |
| | | | | 0,176 | | 0,087 | |
| | | | | 0,355 | | | |
| | | | | 0,360 | | | |

Tabelle 8.285: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,6 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 49,4 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$,
Bezugsgröße 1-Propanol

| 2-Chlorbenzaldehyd | | 1-Propanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|------------|--------------------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,319 | $1,34 \pm_{0,02}^{0,08}$ | 1,0 | $1,03 \pm_{0,03}^{0,04}$ | 0,258 | $0,243 \pm_{0,023}^{0,022}$ | 0,116 | $0,114 \pm_{0,011}^{0,009}$ |
| 1,408 | | 1,017 | | 0,256 | | 0,122 | |
| 1,348 | | 1,061 | | 0,246 | | 0,120 | |
| 1,415 | | | | 0,265 | | 0,103 | |
| 1,356 | | | | 0,255 | | 0,112 | |
| 1,319 | | | | 0,219 | | 0,108 | |
| | | | | 0,227 | | 0,115 | |
| | | | | 0,465 | | | |
| | | | | 0,478 | | | |

Tabelle 8.286: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 74,3 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 25,7 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$,
Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd

| 2-Chlorbenzaldehyd | | 1-Propanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|------------|-----------------------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,05 \pm_{0,05}^{0,04}$ | 0,168 | $0,174 \pm_{0,007}^{0,005}$ | 0,082 | $0,077 \pm_{0,002}^{0,005}$ | 0,033 | $0,035 \pm_{0,004}^{0,003}$ |
| 1,089 | | 0,176 | | 0,078 | | 0,037 | |
| 1,043 | | 0,179 | | 0,074 | | 0,038 | |
| 1,072 | | | | 0,081 | | 0,034 | |
| 1,034 | | | | 0,082 | | 0,031 | |
| 1,033 | | | | 0,075 | | 0,036 | |
| | | | | 0,074 | | | |
| | | | | 0,148 | | | |
| | | | | 0,148 | | | |

Tabelle 8.287: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 74,3 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 25,7 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$,
Bezugsgröße 1-Propanol

| 2-Chlorbenzaldehyd | | 1-Propanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|-------------------|------------|--------------------------|----------|-----------------------------|-----------|----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 5,952 | $6,24 \pm_{0,29}$ | 1,0 | $1,05 \pm_{0,05}^{0,03}$ | 0,488 | $0,458 \pm_{0,027}^{0,032}$ | 0,210 | $0,205 \pm_{0,022}^{0,17}$ |
| 6,525 | | 1,059 | | 0,476 | | 0,213 | |
| 6,196 | | 1,080 | | 0,452 | | 0,206 | |
| 6,410 | | | | 0,483 | | 0,196 | |
| 6,159 | | | | 0,490 | | 0,183 | |
| 6,186 | | | | 0,431 | | 0,222 | |
| | | | | 0,433 | | | |
| | | | | 0,893 | | | |
| | | | | 0,891 | | | |

Tabelle 8.288: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 86,7 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 10,5 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$,
Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd

| 2-Chlorbenzaldehyd | | 1-Propanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|------------|-----------------------------|----------|-----------------------------|-----------|---------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,01 \pm_{0,04}^{0,03}$ | 0,065 | $0,062 \pm_{0,001}^{0,003}$ | 0,017 | $0,018 \pm_{0,001}^{0,002}$ | 0,016 | $0,015 \pm_{0,001}$ |
| 1,038 | | 0,061 | | 0,016 | | 0,015 | |
| 0,981 | | 0,061 | | 0,018 | | 0,015 | |
| 1,033 | | | | 0,020 | | 0,014 | |
| 1,031 | | | | 0,019 | | 0,016 | |
| 0,974 | | | | 0,018 | | | |
| | | | | 0,017 | | | |
| | | | | 0,036 | | | |
| | | | | 0,033 | | | |

Tabelle 8.289: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 86,7 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 10,5 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$,
Bezugsgröße 1-Propanol

| 2-Chlorbenzaldehyd | | 1-Propanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|---------------------------|------------|--------------------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 16,053 | $16,19 \pm_{0,62}^{0,53}$ | 1,0 | $0,98 \pm_{0,01}^{0,02}$ | 0,277 | $0,271 \pm_{0,038}^{0,037}$ | 0,262 | $0,236 \pm_{0,017}^{0,026}$ |
| 16,717 | | 0,976 | | 0,257 | | 0,226 | |
| 15,726 | | 0,977 | | 0,233 | | 0,237 | |
| 16,505 | | | | 0,308 | | 0,219 | |
| 16,546 | | | | 0,259 | | 0,235 | |
| 15,561 | | | | 0,289 | | | |
| | | | | 0,271 | | | |
| | | | | 0,565 | | | |
| | | | | 0,522 | | | |

273 K

Tabelle 8.290: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 38,9 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 59,3 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$,
Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd

| 2-Chlorbenzaldehyd | | 1-Propanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|------------|----------------------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,05 \pm_{0,07}^{0,05}$ | 1,305 | $1,32 \pm_{0,018}^{0,011}$ | 0,708 | $0,661 \pm_{0,031}^{0,047}$ | 0,198 | $0,198 \pm_{0,018}^{0,017}$ |
| 1,079 | | 1,334 | | 0,704 | | 0,198 | |
| 1,025 | | 1,331 | | 0,630 | | 0,214 | |
| 1,094 | | | | 0,656 | | 0,201 | |
| 0,974 | | | | 0,668 | | 0,198 | |
| 1,095 | | | | 0,637 | | 0,181 | |
| | | | | 0,654 | | 0,180 | |
| | | | | 1,285 | | 0,212 | |
| | | | | 1,327 | | | |

Tabelle 8.291: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 38,9 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 59,3 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$,
Bezugsgröße 1-Propanol

| 2-Chlorbenzaldehyd | | 1-Propanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|-----------------------------|------------|--------------------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,781 | $0,816 \pm_{0,058}^{0,044}$ | 1,0 | $1,02 \pm_{0,02}^{0,01}$ | 0,551 | $0,513 \pm_{0,029}^{0,039}$ | 0,154 | $0,152 \pm_{0,012}^{0,013}$ |
| 0,848 | | 1,032 | | 0,549 | | 0,154 | |
| 0,797 | | 1,028 | | 0,494 | | 0,160 | |
| 0,860 | | | | 0,500 | | 0,156 | |
| 0,758 | | | | 0,518 | | 0,145 | |
| 0,852 | | | | 0,483 | | 0,140 | |
| | | | | 0,503 | | 0,140 | |
| | | | | 1,019 | | 0,165 | |
| | | | | 1,022 | | | |

Tabelle 8.292: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,4 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 49,6 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$,
Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd

| 2-Chlorbenzaldehyd | | 1-Propanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|------------|-----------------------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,04 \pm_{0,07}^{0,05}$ | 0,667 | $0,674 \pm_{0,007}^{0,006}$ | 0,406 | $0,385 \pm_{0,022}^{0,037}$ | 0,130 | $0,131 \pm_{0,008}^{0,007}$ |
| 1,078 | | 0,680 | | 0,422 | | 0,138 | |
| 1,007 | | 0,675 | | 0,372 | | 0,134 | |
| 1,075 | | | | 0,379 | | 0,138 | |
| 0,970 | | | | 0,413 | | 0,130 | |
| 1,081 | | | | 0,362 | | 0,125 | |
| | | | | 0,372 | | 0,123 | |
| | | | | 0,744 | | 0,129 | |
| | | | | 0,762 | | | |

Tabelle 8.293: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,4 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 49,6 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$,
Bezugsgröße 1-Propanol

| 2-Chlorbenzaldehyd | | 1-Propanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|---------------------------|------------|--------------------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,517 | $1,570 \pm_{0,09}^{0,06}$ | 1,0 | $1,01 \pm_{0,01}^{0,02}$ | 0,620 | $0,583 \pm_{0,033}^{0,043}$ | 0,197 | $0,199 \pm_{0,013}^{0,010}$ |
| 1,620 | | 1,029 | | 0,626 | | 0,199 | |
| 1,541 | | 1,013 | | 0,562 | | 0,202 | |
| 1,634 | | | | 0,591 | | 0,201 | |
| 1,478 | | | | 0,621 | | 0,207 | |
| 1,631 | | | | 0,550 | | 0,189 | |
| | | | | 0,558 | | 0,186 | |
| | | | | 1,122 | | 0,209 | |
| | | | | 1,163 | | | |

Tabelle 8.294: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,4 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 39,4 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$,
Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd

| 2-Chlorbenzaldehyd | | 1-Propanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|------------|-----------------------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,05 \pm_{0,07}^{0,05}$ | 0,281 | $0,281 \pm_{0,001}^{0,002}$ | 0,277 | $0,262 \pm_{0,014}^{0,015}$ | 0,084 | $0,091 \pm_{0,014}^{0,018}$ |
| 1,097 | | 0,280 | | 0,267 | | 0,087 | |
| 1,020 | | 0,283 | | 0,248 | | 0,098 | |
| 1,089 | | | | 0,257 | | 0,109 | |
| 0,975 | | | | 0,273 | | 0,090 | |
| 1,092 | | | | 0,252 | | 0,081 | |
| | | | | 0,253 | | 0,077 | |
| | | | | 0,522 | | 0,104 | |
| | | | | 0,536 | | | |

Tabelle 8.295: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,4 Mol% 2-Chlorbenzaldehyd und 39,4 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$,
Bezugsgröße 1-Propanol

| 2-Chlorbenzaldehyd | | 1-Propanol | | VA | | HA 1 | |
|--------------------|--------------------------|------------|-----------------------------|----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{2-C} | \bar{A}_{2-C} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{VA} | \bar{A}_{VA} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 3,568 | $3,74 \pm_{0,22}^{0,17}$ | 1,0 | $0,999 \pm_{0,009}^{0,008}$ | 0,990 | $0,936 \pm_{0,059}^{0,054}$ | 0,297 | $0,307 \pm_{0,038}^{0,047}$ |
| 3,906 | | 0,990 | | 0,953 | | 0,307 | |
| 3,696 | | 1,007 | | 0,907 | | 0,308 | |
| 3,866 | | | | 0,943 | | 0,354 | |
| 3,514 | | | | 0,976 | | 0,289 | |
| 3,866 | | | | 0,877 | | 0,282 | |
| | | | | 0,899 | | 0,269 | |
| | | | | 1,871 | | 0,351 | |
| | | | | 1,875 | | | |

255 K

Probe trüb

8.1.3.19 3-Phenylpropanal + Methanol

295 K

Tabelle 8.296: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 23,0 Mol% 3-Phenylpropanal und 76,3 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 3-Phenylpropanal

| 3-Phenylpropanal | | Methanol | | HA 1 | |
|------------------|-----------------------------|----------|-------------|-----------|------------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $0,986 \pm_{0,013}^{0,014}$ | 31,492 | 31,492 | 11,880 | $11,947 \pm_{0,178}^{0,412}$ |
| 0,973 | | | | 11,779 | |
| 0,985 | | | | 12,359 | |
| | | | | 11,769 | |

Tabelle 8.297: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 23,0 Mol% 3-Phenylpropanal und 76,3 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| 3-Phenylpropanal | | Methanol | | HA 1 | |
|------------------|-------------------|----------|-------------|-----------|-----------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,032 | $0,031 \pm 0,001$ | 1,00 | 1,00 | 0,380 | $0,380 \pm_{0,007}^{0,009}$ |
| 0,030 | | | | 0,373 | |
| 0,031 | | | | 0,389 | |
| | | | | 0,377 | |

Tabelle 8.298: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 38,9 Mol% 3-Phenylpropanal und 59,9 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 3-Phenylpropanal

| 3-Phenylpropanal | | Methanol | | HA 1 | |
|------------------|-----------------------------|----------|-------------|-----------|-----------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,048 \pm_{0,048}^{0,042}$ | 9,406 | 9,406 | 7,451 | $7,178 \pm_{0,408}^{0,785}$ |
| 1,090 | | | | 7,963 | |
| 1,054 | | | | 6,796 | |
| | | | | 6,786 | |
| | | | | 6,770 | |
| | | | | 7,301 | |

Tabelle 8.299: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 38,9 Mol%
3-Phenylpropanal und 59,9 Mol% Methanol
bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| 3-Phenylpropanal | | Methanol | | HA 1 | |
|------------------|-------------------|----------|-------------|-----------|---|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,105 | 0,111 \pm 0,006 | 1,0 | 1,0 | 0,779 | 0,752 \pm ^{0,090} _{0,042} |
| 0,117 | | | | 0,842 | |
| 0,112 | | | | 0,711 | |
| | | | | 0,710 | |
| | | | | 0,728 | |
| | | | | 0,738 | |

Tabelle 8.300: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,4 Mol%
3-Phenylpropanal und 50,1 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$,
Bezugsgröße 3-Phenylpropanal

| 3-Phenylpropanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|------------------|--|----------|-------------|-----------|--|-----------|---|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,0 | 1,02 \pm ^{0,044} _{0,038} | 1,42 | 1,42 | 2,941 | 2,78 \pm ^{0,21} _{0,28} | 0,054 | 0,051 \pm ^{0,002} _{0,004} |
| 1,068 | | | | 2,993 | | 0,053 | |
| 1,006 | | | | 2,736 | | 0,047 | |
| 1,059 | | | | 2,505 | | | |
| 0,986 | | | | 2,797 | | | |
| | | | | 2,725 | | | |

Tabelle 8.301: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,4 Mol%
3-Phenylpropanal und 50,1 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$,
Bezugsgröße Methanol

| 3-Phenylpropanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|------------------|---|----------|-------------|-----------|--|-----------|---|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 0,712 | 0,729 \pm ^{0,043} _{0,025} | 1,0 | 1,0 | 2,087 | 1,95 \pm ^{0,14} _{0,16} | 0,038 | 0,036 \pm ^{0,002} _{0,003} |
| 0,772 | | | | 2,012 | | 0,037 | |
| 0,704 | | | | 1,923 | | 0,033 | |
| 0,750 | | | | 1,792 | | | |
| 0,707 | | | | 1,927 | | | |
| | | | | 1,944 | | | |

Tabelle 8.302: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 74,7 Mol% 3-Phenylpropanal und 23,0 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 3-Phenylpropanal

| 3-Phenylpropanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|------------------|-----------------------------|----------|-------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 1,0 | $0,989 \pm_{0,027}^{0,016}$ | 0,070 | 0,070 | 0,406 | $0,402 \pm_{0,018}^{0,014}$ | 0,023 | $0,022 \pm_{0,002}^{0,001}$ | 0,015 | $0,014 \pm_{0,002}^{0,001}$ |
| 1,004 | | | | 0,384 | | 0,023 | | 0,013 | |
| 0,961 | | | | 0,416 | | 0,020 | | 0,013 | |
| | | | | | | | | 0,016 | |

Tabelle 8.303: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 74,7 Mol% 3-Phenylpropanal und 23,0 Mol% Methanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| 3-Phenylpropanal | | Methanol | | HA 1 | | HA 2 | | HA 3 | |
|------------------|---------------------------|----------|-------------|-----------|--------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} | A_{HA3} | \bar{A}_{HA3} |
| 14,184 | $13,99 \pm_{0,35}^{0,20}$ | 1,0 | 1,0 | 5,760 | $5,68 \pm_{0,25}^{0,17}$ | 0,357 | $0,314 \pm_{0,041}^{0,044}$ | 0,200 | $0,191 \pm_{0,007}^{0,009}$ |
| 14,145 | | | | 5,427 | | 0,311 | | 0,188 | |
| 13,635 | | | | 5,841 | | 0,273 | | 0,191 | |
| | | | | | | | | 0,184 | |

273 K

Tabelle 8.304: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 38,6 Mol% 3-Phenylpropanal und 60,2 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 3-Phenylpropanal

| 3-Phenylpropanal | | Methanol | | HA 1 | |
|------------------|----------------------------|----------|-------------|-----------|---------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,01 \pm_{0,065}^{0,061}$ | 17,814 | 17,814 | 22,798 | $21,47 \pm_{1,68}^{1,33}$ |
| 1,069 | | | | 22,425 | |
| 0,943 | | | | 20,597 | |
| 1,021 | | | | 19,787 | |
| | | | | 20,962 | |
| | | | | 22,234 | |

Tabelle 8.305: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 38,6 Mol% 3-Phenylpropanal und 60,2 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| 3-Phenylpropanal | | Methanol | | HA 1 | |
|------------------|-----------------------------|----------|-------------|-----------|-----------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,059 | $0,057 \pm_{0,004}^{0,002}$ | 1,0 | 1,0 | 1,277 | $1,204 \pm_{0,096}^{0,091}$ |
| 0,053 | | | | 1,248 | |
| 0,059 | | | | 1,159 | |
| | | | | 1,109 | |
| | | | | 1,139 | |
| | | | | 1,295 | |

Tabelle 8.306: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,7 Mol% 3-Phenylpropanal und 49,8 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 3-Phenylpropanal

| 3-Phenylpropanal | | Methanol | | HA 1 | |
|------------------|----------------------------|----------|-------------|-----------|---------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,07 \pm_{0,065}^{0,094}$ | 4,916 | 4,916 | 11,866 | $11,39 \pm_{0,83}^{0,48}$ |
| 1,158 | | | | 11,366 | |
| 1,036 | | | | 10,559 | |
| | | | | 11,764 | |

Tabelle 8.307: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,7 Mol% 3-Phenylpropanal und 49,8 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| 3-Phenylpropanal | | Methanol | | HA 1 | |
|------------------|-----------------------------|----------|-------------|-----------|---------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,203 | $0,223 \pm_{0,021}^{0,029}$ | 1,0 | 1,0 | 2,423 | $2,343 \pm_{0,17}^{0,12}$ |
| 0,252 | | | | 2,319 | |
| 0,215 | | | | 2,170 | |
| | | | | 2,459 | |

Tabelle 8.308: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,6 Mol% 3-Phenylpropanal und 39,6 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 3-Phenylpropanal

| 3-Phenylpropanal | | Methanol | | HA 1 | |
|------------------|-----------------------------|----------|-------------|-----------|--------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,016 \pm_{0,030}^{0,042}$ | 0,433 | 0,433 | 3,643 | $3,09 \pm_{0,47}^{0,55}$ |
| 1,059 | | | | 2,779 | |
| 0,986 | | | | 2,617 | |
| 1,020 | | | | 2,891 | |
| | | | | 3,518 | |

Tabelle 8.309: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,6 Mol% 3-Phenylpropanal und 39,6 Mol% Methanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| 3-Phenylpropanal | | Methanol | | HA 1 | |
|------------------|---------------------------|----------|-------------|-----------|--------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 2,368 | $2,42 \pm_{0,064}^{0,10}$ | 1,0 | 1,0 | 8,669 | $7,38 \pm_{1,24}^{1,29}$ |
| 2,519 | | | | 6,676 | |
| 2,356 | | | | 6,146 | |
| 2,436 | | | | 7,065 | |
| | | | | 8,356 | |

255 K

Tabelle 8.310: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,7 Mol% 3-Phenylpropanal und 49,8 Mol% Methanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße 3-Phenylpropanal

| 3-Phenylpropanal | | Methanol | | HA 1 | |
|------------------|-----------------------------|----------|-------------|-----------|---------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $0,979 \pm_{0,107}^{0,086}$ | 8,564 | 8,564 | 24,513 | $25,02 \pm_{1,82}^{3,27}$ |
| 0,872 | | | | 24,073 | |
| 1,065 | | | | 23,199 | |
| | | | | 28,289 | |

Tabelle 8.311: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,7 Mol% 3-Phenylpropanal und 49,8 Mol% Methanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Methanol

| 3-Phenylpropanal | | Methanol | | HA 1 | |
|------------------|---------------------|----------|-------------|-----------|--------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_M | \bar{A}_M | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,114 | $0,114 \pm_{0,011}$ | 1,0 | 1,0 | 2,962 | $2,96 \pm_{0,22}^{0,33}$ |
| 0,102 | | | | 2,833 | |
| 0,124 | | | | 2,741 | |
| | | | | 3,287 | |

8.1.3.20 3-Phenylpropanal + Ethanol**295 K**

Tabelle 8.312: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 23,0 Mol% 3-Phenylpropanal und 74,8 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 3-Phenylpropanal

| 3-Phenylpropanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|------------------|-----------------------------|---------|----------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $0,996 \pm_{0,007}^{0,004}$ | 18,047 | $18,708 \pm_{0,661}$ | 5,866 | $5,681 \pm_{0,213}^{0,204}$ |
| 0,990 | | | | 5,633 | |
| 0,999 | | | | 5,468 | |
| | | | | 5,885 | |
| | | | | 5,625 | |
| | | | | 5,609 | |

Tabelle 8.313: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 23,0 Mol% 3-Phenylpropanal und 74,8 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| 3-Phenylpropanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|------------------|-------------------|---------|------------------|-----------|--|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,055 | $0,055 \pm 0,001$ | 1,0 | $1,040 \pm 0,04$ | 0,335 | $0,316 \pm \begin{smallmatrix} 0,019 \\ 0,014 \end{smallmatrix}$ |
| 0,054 | | 1,080 | | 0,312 | |
| 0,056 | | | | 0,302 | |
| | | | | 0,328 | |
| | | | | 0,306 | |
| | | | | 0,314 | |

Tabelle 8.314: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 38,7 Mol% 3-Phenylpropanal und 58,9 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 3-Phenylpropanal

| 3-Phenylpropanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|------------------|--|---------|-------------------|-----------|--|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,043 \pm \begin{smallmatrix} 0,040 \\ 0,043 \end{smallmatrix}$ | 3,148 | $3,100 \pm 0,048$ | 2,388 | $2,250 \pm \begin{smallmatrix} 0,138 \\ 0,081 \end{smallmatrix}$ |
| 1,084 | | 3,051 | | 2,169 | |
| 1,046 | | | | 2,178 | |
| | | | | 2,234 | |
| | | | | 2,312 | |
| | | | | 2,218 | |

Tabelle 8.315: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 38,7 Mol% 3-Phenylpropanal und 58,9 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| 3-Phenylpropanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|------------------|--|---------|-------------------|-----------|--|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,313 | $0,326 \pm \begin{smallmatrix} 0,016 \\ 0,013 \end{smallmatrix}$ | 1,0 | $0,977 \pm 0,023$ | 0,732 | $0,701 \pm \begin{smallmatrix} 0,031 \\ 0,022 \end{smallmatrix}$ |
| 0,342 | | 0,953 | | 0,683 | |
| 0,324 | | | | 0,679 | |
| | | | | 0,699 | |
| | | | | 0,724 | |
| | | | | 0,689 | |

Tabelle 8.316: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 51,0 Mol% 3-Phenylpropanal und 46,5 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 3-Phenylpropanal

| 3-Phenylpropanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|------------------|-----------------------------|---------|-------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,0 | $0,998 \pm_{0,040}^{0,045}$ | 0,970 | $0,962 \pm 0,009$ | 1,272 | $1,245 \pm_{0,014}^{0,027}$ | 0,050 | $0,048 \pm_{0,002}^{0,001}$ |
| 1,043 | | 0,953 | | 1,240 | | 0,049 | |
| 1,005 | | | | 1,231 | | 0,047 | |
| 0,984 | | | | 1,261 | | | |
| 0,958 | | | | 1,235 | | | |
| | | | | 1,231 | | | |

Tabelle 8.317: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 51,0 Mol% 3-Phenylpropanal und 46,5 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| 3-Phenylpropanal | | Ethanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|------------------|-----------------------------|---------|-------------|-----------|-------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,055 | $1,052 \pm_{0,051}^{0,039}$ | 1,00 | 1,0 | 1,362 | $1,320 \pm 0,042$ | 0,052 | $0,051 \pm_{0,002}^{0,001}$ |
| 1,091 | | 1,00 | | 1,316 | | 0,052 | |
| 1,061 | | | | 1,311 | | 0,049 | |
| 1,053 | | | | 1,331 | | | |
| 1,001 | | | | 1,320 | | | |
| | | | | 1,278 | | | |

Tabelle 8.318: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 70,1 Mol% 3-Phenylpropanal und 27,1 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 3-Phenylpropanal

| 3-Phenylpropanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|------------------|-----------------------------|---------|-------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,003 \pm_{0,022}^{0,042}$ | 0,185 | $0,188 \pm 0,003$ | 0,480 | $0,422 \pm_{0,037}^{0,058}$ |
| 1,045 | | 0,190 | | 0,403 | |
| 0,985 | | | | 0,400 | |
| 0,981 | | | | 0,442 | |
| 1,004 | | | | 0,385 | |
| | | | | | |

Tabelle 8.319: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 70,1 Mol% 3-Phenylpropanal und 27,1 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| 3-Phenylpropanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|------------------|--------------------------|---------|-------------------|-----------|--------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 5,400 | $5,39 \pm_{0,14}^{0,24}$ | 1,0 | $1,011 \pm 0,011$ | 2,609 | $2,27 \pm_{0,18}^{0,34}$ |
| 5,631 | | 1,022 | | 2,133 | |
| 5,259 | | | | 2,132 | |
| 5,254 | | | | 2,380 | |
| 5,404 | | | | 2,090 | |
| | | | | | |

Tabelle 8.320: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 83,9 Mol% 3-Phenylpropanal und 13,2 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 3-Phenylpropanal

| 3-Phenylpropanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|------------------|-----------------------------|---------|-------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,014 \pm_{0,017}^{0,053}$ | 0,035 | $0,037 \pm 0,002$ | 0,185 | $0,160 \pm_{0,024}^{0,025}$ |
| 1,067 | | 0,039 | | 0,136 | |
| 0,997 | | | | 0,137 | |
| 1,002 | | | | 0,182 | |
| 1,003 | | | | 0,171 | |
| | | | | 0,150 | |

Tabelle 8.321: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 83,9 Mol% 3-Phenylpropanal und 13,2 Mol% Ethanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| 3-Phenylpropanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|------------------|---------------------------|---------|-----------------|-----------|---------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 28,293 | $28,70 \pm_{0,47}^{1,56}$ | 1,0 | $1,05 \pm 0,05$ | 4,953 | $4,502 \pm_{0,69}^{0,61}$ |
| 30,259 | | 1,095 | | 3,811 | |
| 28,233 | | | | 4,031 | |
| 28,452 | | | | 5,114 | |
| 28,269 | | | | 4,833 | |
| | | | | 4,270 | |

273 K

Tabelle 8.322: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 38,7 Mol% 3-Phenylpropanal und 58,9 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 3-Phenylpropanal

| 3-Phenylpropanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|------------------|-----------------------------|---------|-------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,069 \pm_{0,085}^{0,151}$ | 6,068 | $6,216 \pm 0,148$ | 7,828 | $7,219 \pm_{0,934}^{0,689}$ |
| 1,219 | | 6,364 | | 7,908 | |
| 1,072 | | | | 6,625 | |
| 0,983 | | | | 6,285 | |
| | | | | 7,277 | |
| | | | | 7,775 | |
| | | | | 6,834 | |

Tabelle 8.323: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 38,7 Mol% 3-Phenylpropanal und 58,9 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| 3-Phenylpropanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|------------------|-----------------------------|---------|-------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,165 | $0,175 \pm_{0,014}^{0,028}$ | 1,0 | $1,024 \pm 0,024$ | 1,287 | $1,182 \pm_{0,146}^{0,151}$ |
| 0,203 | | 1,048 | | 1,333 | |
| 0,171 | | | | 1,087 | |
| 0,161 | | | | 1,036 | |
| | | | | 1,101 | |
| | | | | 1,304 | |
| | | | | 1,126 | |

Tabelle 8.324: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,7 Mol% 3-Phenylpropanal und 48,8 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 3-Phenylpropanal

| 3-Phenylpropanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|------------------|-----------------------------|---------|-------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,014 \pm_{0,033}^{0,050}$ | 2,472 | $2,567 \pm 0,095$ | 5,483 | $4,829 \pm_{0,697}^{0,654}$ |
| 1,064 | | 2,663 | | 5,471 | |
| 0,981 | | | | 4,360 | |
| 1,011 | | | | 4,132 | |
| | | | | 4,675 | |
| | | | | 5,210 | |
| | | | | 4,471 | |

Tabelle 8.325: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,7 Mol% 3-Phenylpropanal und 48,8 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| 3-Phenylpropanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|------------------|-----------------------------|---------|-------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,405 | $0,406 \pm_{0,025}^{0,022}$ | 1,0 | $1,036 \pm 0,036$ | 2,197 | $1,963 \pm_{0,267}^{0,234}$ |
| 0,428 | | 1,072 | | 2,159 | |
| 0,381 | | | | 1,823 | |
| 0,411 | | | | 1,695 | |
| | | | | 1,861 | |
| | | | | 2,191 | |
| | | | | 1,811 | |

Tabelle 8.326: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,5 Mol% 3-Phenylpropanal und 38,9 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 3-Phenylpropanal

| 3-Phenylpropanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|------------------|-----------------------------|---------|-------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $0,994 \pm_{0,034}^{0,045}$ | 0,604 | $0,618 \pm 0,014$ | 1,936 | $2,052 \pm_{0,246}^{0,358}$ |
| 1,038 | | 0,633 | | 1,805 | |
| 0,960 | | | | 2,080 | |
| 0,977 | | | | 2,410 | |
| | | | | 2,027 | |

Tabelle 8.327: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 58,5 Mol% 3-Phenylpropanal und 38,9 Mol% Ethanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| 3-Phenylpropanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|------------------|-----------------------------|---------|------------------|-----------|---------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,649 | $1,644 \pm_{0,071}^{0,098}$ | 1,0 | $1,019 \pm 0,02$ | 3,203 | $3,430 \pm_{0,30}^{0,65}$ |
| 1,743 | | 1,038 | | 3,130 | |
| 1,574 | | | | 3,422 | |
| 1,611 | | | | 4,077 | |
| | | | | 3,320 | |

255 K

Tabelle 8.328: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,7 Mol% 3-Phenylpropanal und 48,8 Mol% Ethanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße 3-Phenylpropanal

| 3-Phenylpropanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|------------------|-----------------------------|---------|-------------------|-----------|------------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $0,973 \pm_{0,040}^{0,027}$ | 5,274 | $5,464 \pm 0,189$ | 13,034 | $12,697 \pm_{0,795}^{0,337}$ |
| 0,986 | | 5,653 | | 11,902 | |
| 0,933 | | | | 12,874 | |
| | | | | 12,978 | |

Tabelle 8.329: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 48,7 Mol% 3-Phenylpropanal und 48,8 Mol% Ethanol bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Ethanol

| 3-Phenylpropanal | | Ethanol | | HA 1 | |
|------------------|-----------------------------|---------|-------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_E | \bar{A}_E | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,204 | $0,188 \pm_{0,017}^{0,016}$ | 1,0 | $1,049 \pm 0,049$ | 2,556 | $2,442 \pm_{0,205}^{0,114}$ |
| 0,190 | | 1,099 | | 2,237 | |
| 0,171 | | | | 2,437 | |
| | | | | 2,539 | |

8.1.3.21 3-Phenylpropanal + 1-Propanol

295 K

Tabelle 8.330: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 9,7 Mol% 3-Phenylpropanal und 89,9 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 3-Phenylpropanal

| 3-Phenylpropanal | | 1-Propanol | | HA 1 | |
|------------------|--------------------------|------------|---------------------------|-----------|---------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,07 \pm_{0,12}^{0,23}$ | 74,773 | $76,24 \pm_{1,47}^{2,49}$ | 11,580 | $10,42 \pm_{0,85}^{1,16}$ |
| 1,297 | | 75,217 | | 10,989 | |
| 0,950 | | 78,723 | | 9,572 | |
| 1,050 | | | | 9,939 | |
| 1,057 | | | | 10,529 | |
| | | | | 9,603 | |
| | | | | 10,166 | |
| | | | | 10,991 | |

Tabelle 8.331: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 9,7 Mol% 3-Phenylpropanal und 89,9 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| 3-Phenylpropanal | | 1-Propanol | | HA 1 | |
|------------------|-----------------------------|------------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,014 | $0,015 \pm_{0,002}^{0,003}$ | 1,0 | $1,019 \pm_{0,019}^{0,029}$ | 0,154 | $0,138 \pm_{0,010}^{0,016}$ |
| 0,018 | | 1,009 | | 0,145 | |
| 0,013 | | 1,048 | | 0,129 | |
| 0,014 | | | | 0,133 | |
| 0,015 | | | | 0,141 | |
| | | | | 0,129 | |
| | | | | 0,132 | |
| | | | | 0,146 | |

Tabelle 8.332: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 24,3 Mol% 3-Phenylpropanal und 74,2 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 3-Phenylpropanal

| 3-Phenylpropanal | | 1-Propanol | | HA 1 | |
|------------------|-----------------------------|------------|---------------------------|-----------|--------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $0,999 \pm_{0,011}^{0,023}$ | 13,659 | $13,64 \pm_{0,17}^{0,15}$ | 5,133 | $5,05 \pm_{0,14}^{0,28}$ |
| 1,022 | | 13,796 | | 5,336 | |
| 0,997 | | 13,473 | | 4,942 | |
| 0,988 | | | | 5,000 | |
| 0,990 | | | | 5,034 | |
| | | | | 5,076 | |
| | | | | 4,913 | |
| | | | | 4,985 | |

Tabelle 8.333: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 24,3 Mol% 3-Phenylpropanal und 74,2 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| 3-Phenylpropanal | | 1-Propanol | | HA 1 | |
|------------------|---------------------|------------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,073 | $0,073 \pm_{0,001}$ | 1,0 | $0,999 \pm_{0,017}^{0,016}$ | 0,378 | $0,372 \pm_{0,011}^{0,022}$ |
| 0,075 | | 1,015 | | 0,394 | |
| 0,073 | | 0,983 | | 0,360 | |
| 0,073 | | | | 0,367 | |
| 0,073 | | | | 0,371 | |
| | | | | 0,376 | |
| | | | | 0,361 | |
| | | | | 0,367 | |

Tabelle 8.334: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 50,2 Mol% 3-Phenylpropanal und 47,7 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 3-Phenylpropanal

| 3-Phenylpropanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|------------------|-----------------------------|------------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,0 | $1,028 \pm_{0,062}^{0,071}$ | 1,042 | $1,043 \pm_{0,032}^{0,033}$ | 1,325 | $1,314 \pm_{0,081}^{0,088}$ | 0,038 | $0,041 \pm_{0,003}^{0,005}$ |
| 1,099 | | 1,011 | | 1,233 | | 0,039 | |
| 1,037 | | 1,076 | | 1,334 | | 0,046 | |
| 1,039 | | | | 1,311 | | | |
| 0,967 | | | | 1,278 | | | |
| | | | | 1,402 | | | |

Tabelle 8.335: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 50,2 Mol% 3-Phenylpropanal und 47,7 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| 3-Phenylpropanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|------------------|-----------------------------|------------|--------------------------|-----------|--------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 0,953 | $0,986 \pm_{0,054}^{0,059}$ | 1,0 | $1,01 \pm_{0,03}^{0,04}$ | 1,259 | $1,25 \pm_{0,06}^{0,09}$ | 0,036 | $0,039 \pm_{0,004}^{0,005}$ |
| 1,045 | | 0,982 | | 1,188 | | 0,037 | |
| 0,999 | | 1,046 | | 1,250 | | 0,044 | |
| 1,000 | | | | 1,237 | | | |
| 0,932 | | | | 1,213 | | | |
| | | | | 1,340 | | | |

Tabelle 8.336: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 73,1 Mol% 3-Phenylpropanal und 24,4 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 3-Phenylpropanal

| 3-Phenylpropanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|------------------|-----------------------------|------------|-----------------|-----------|-----------------------------|-----------|-----------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,0 | $1,036 \pm_{0,044}^{0,065}$ | 0,078 | 0,082±0,004 | 0,312 | $0,265 \pm_{0,039}^{0,047}$ | 0,022 | 0,021±0,001 |
| 1,102 | | 0,083 | | 0,254 | | 0,021 | |
| 0,992 | | 0,086 | | 0,227 | | 0,021 | |
| 1,056 | | | | 0,294 | | | |
| 1,032 | | | | 0,228 | | | |
| | | | | 0,279 | | | |

Tabelle 8.337: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 73,1 Mol% 3-Phenylpropanal und 24,4 Mol% 1-Propanol bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| 3-Phenylpropanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|------------------|---------------------------|------------|--------------------------|-----------|--------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 13,075 | $13,56 \pm_{0,51}^{0,87}$ | 1,0 | $1,06 \pm_{0,06}^{0,05}$ | 4,125 | $3,48 \pm_{0,53}^{0,65}$ | 0,284 | $0,275 \pm_{0,009}^{0,008}$ |
| 14,430 | | 1,074 | | 3,322 | | 0,276 | |
| 13,049 | | 1,106 | | 2,947 | | 0,267 | |
| 13,769 | | | | 3,784 | | | |
| 13,457 | | | | 3,464 | | | |
| | | | | 3,036 | | | |
| | | | | 3,680 | | | |

273 K

Tabelle 8.338: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 38,9 Mol% 3-Phenylpropanal und 59,3 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 3-Phenylpropanal

| 3-Phenylpropanal | | 1-Propanol | | HA 1 | |
|------------------|--|------------------|---|------------------|---|
| A _{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A _{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A _{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | 1,066± ^{0,197} _{0,099} | 12,701 | 12,170± ^{0,53} _{0,32} | 11,677 | 10,709± ^{0,97} _{0,52} |
| 1,263 | | 11,847 | | 10,391 | |
| 1,035 | | 11,961 | | 10,386 | |
| 0,967 | | | | 10,714 | |
| | | | | 11,127 | |
| | | | | 10,192 | |
| | | | | 10,478 | |

Tabelle 8.339: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 38,9 Mol% 3-Phenylpropanal und 59,3 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| 3-Phenylpropanal | | 1-Propanol | | HA 1 | |
|------------------|--|------------------|--|------------------|--|
| A _{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A _{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A _{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,078 | 0,084± ^{0,016} _{0,011} | 1,0 | 0,970± ^{0,030} _{0,029} | 0,921 | 0,842± ^{0,079} _{0,052} |
| 0,100 | | 0,940 | | 0,848 | |
| 0,086 | | 0,969 | | 0,814 | |
| 0,073 | | | | 0,863 | |
| | | | | 0,837 | |
| | | | | 0,790 | |
| | | 0,820 | | | |

Tabelle 8.340: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,1 Mol% 3-Phenylpropanal und 48,9 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 3-Phenylpropanal

| 3-Phenylpropanal | | 1-Propanol | | HA 1 | |
|------------------|---------------------------------------|------------------|---|------------------|---------------------------------------|
| A _{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A _{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A _{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | 1,02± ^{0,09} _{0,07} | 2,846 | 2,90± ^{0,033} _{0,056} | 5,818 | 5,29± ^{0,55} _{0,71} |
| 1,111 | | 2,935 | | 5,838 | |
| 1,084 | | 2,924 | | 4,873 | |
| 0,952 | | | | 4,584 | |
| 0,952 | | | | 5,587 | |
| | | | | 5,648 | |
| | | | 4,887 | | |
| | | | | 5,098 | |

Tabelle 8.341: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,1 Mol% 3-Phenylpropanal und 48,9 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| 3-Phenylpropanal | | 1-Propanol | | HA 1 | |
|------------------|-----------------------------|------------|----------------------------|-----------|----------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,346 | $0,353 \pm_{0,029}^{0,040}$ | 1,0 | $1,02 \pm_{0,018}^{0,017}$ | 1,951 | $1,84 \pm_{0,202}^{0,184}$ |
| 0,392 | | 1,035 | | 2,019 | |
| 0,373 | | 1,020 | | 1,673 | |
| 0,328 | | | | 1,633 | |
| 0,324 | | | | 1,942 | |
| | | | | 1,960 | |
| | | | | 1,709 | |
| | | | | 1,794 | |

Tabelle 8.342: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 57,9 Mol% 3-Phenylpropanal und 39,9 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 3-Phenylpropanal

| 3-Phenylpropanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|------------------|---------------------------|------------|---------------------------|-----------|--------------------------|-----------|-----------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,0 | $0,988 \pm_{0,06}^{0,07}$ | 0,693 | $0,723 \pm_{0,03}^{0,04}$ | 2,903 | $2,48 \pm_{0,36}^{0,43}$ | 0,120 | $0,140 \pm_{0,020}^{0,021}$ |
| 1,057 | | 0,760 | | 2,280 | | 0,139 | |
| 0,932 | | 0,715 | | 2,121 | | 0,160 | |
| 0,962 | | | | 2,701 | | | |
| | | | | 2,772 | | | |
| | | | | 2,270 | | | |
| | | | | 2,302 | | | |

Tabelle 8.343: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 57,9 Mol% 3-Phenylpropanal und 39,9 Mol% 1-Propanol bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| 3-Phenylpropanal | | 1-Propanol | | HA 1 | | HA 2 | |
|------------------|--------------------------|------------|-----------------|-----------|--------------------------|-----------|-------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} | A_{HA2} | \bar{A}_{HA2} |
| 1,457 | $1,44 \pm_{0,07}^{0,10}$ | 1,0 | $1,05 \pm 0,05$ | 4,015 | $3,51 \pm_{0,04}^{0,05}$ | 0,162 | $0,199 \pm 0,036$ |
| 1,546 | | 1,102 | | 3,230 | | 0,199 | |
| 1,377 | | 1,046 | | 3,120 | | 0,234 | |
| 1,397 | | | | 3,624 | | | |
| | | | | 3,891 | | | |
| | | | | 3,321 | | | |
| | | | | 3,400 | | | |

255 K

Tabelle 8.344: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,1 Mol%
3-Phenylpropanal und 48,9 Mol% 1-Propanol
bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße 3-Phenylpropanal

| 3-Phenylpropanal | | 1-Propanol | | HA 1 | |
|------------------|-----------------------------|------------|---------------------------|-----------|----------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 1,0 | $1,036 \pm_{0,036}^{0,027}$ | 5,124 | $5,419 \pm_{0,29}^{0,40}$ | 11,164 | $11,715 \pm_{1,16}^{0,86}$ |
| 1,045 | | 5,814 | | 10,559 | |
| 1,063 | | 5,318 | | 12,105 | |
| | | | | 12,570 | |
| | | | | 12,175 | |

Tabelle 8.345: ^{13}C -NMR-Peakflächen der Mischung aus 49,1 Mol%
3-Phenylpropanal und 48,9 Mol% 1-Propanol
bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße 1-Propanol

| 3-Phenylpropanal | | 1-Propanol | | HA 1 | |
|------------------|-----------------------------|------------|-----------------------------|-----------|---------------------------|
| A_{3-P} | \bar{A}_{3-P} | A_{1-P} | \bar{A}_{1-P} | A_{HA1} | \bar{A}_{HA1} |
| 0,200 | $0,202 \pm_{0,002}^{0,004}$ | 1,0 | $1,036 \pm_{0,036}^{0,043}$ | 2,054 | $2,257 \pm_{0,36}^{0,20}$ |
| 0,201 | | 1,079 | | 1,893 | |
| 0,206 | | 1,029 | | 2,448 | |
| | | | | 2,461 | |
| | | | | 2,430 | |

8.1.4 Gleichgewichtskonstanten K_x

$$\Delta n_{Ald}/n_{Alk} = \frac{(n_{Ald}/n_{Alk})_{ber} - (n_{Ald}/n_{Alk})_{exp}}{(n_{Ald}/n_{Alk})_{exp}} \quad (8.1)$$

8.1.4.1 Systeme mit Acetaldehyd

Tabelle 8.346: $K_{x,i}$ des Systems Acetaldehyd und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_A^0 | n_M^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_A/n_M$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 40,8 | 59,2 | 0,101 | 0,397 | 0,488 | 0,010 | 0,003 | 12,16 | 0,017 | 0,276 | -4,8 |
| 49,8 | 50,2 | 0,202 | 0,242 | 0,530 | 0,019 | 0,007 | 10,84 | 0,017 | 0,168 | -8,1 |
| 60,1 | 39,9 | 0,401 | 0,148 | 0,413 | 0,025 | 0,012 | 6,94 | 0,022 | 0,179 | -35,5 |

Tabelle 8.347: $K_{x,i}$ des Systems Acetaldehyd und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_A^0 | n_M^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_A/n_M$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 40,8 | 59,2 | 0,090 | 0,392 | 0,504 | 0,010 | 0,004 | 14,27 | 0,016 | 0,310 | -14,0 |
| 49,8 | 50,2 | 0,198 | 0,240 | 0,534 | 0,020 | 0,008 | 11,24 | 0,017 | 0,177 | -2,7 |
| 60,1 | 39,9 | 0,372 | 0,112 | 0,473 | 0,029 | 0,015 | 11,40 | 0,014 | 0,120 | -20,6 |

Tabelle 8.348: $K_{x,i}$ des Systems Acetaldehyd und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_A^0 | n_M^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_A/n_M$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 40,8 | 59,2 | 0,036 | 0,357 | 0,590 | 0,012 | 0,005 | 45,66 | 0,012 | 0,243 | -1,5 |
| 49,8 | 50,2 | 0,103 | 0,168 | 0,684 | 0,033 | 0,012 | 39,68 | 0,012 | 0,090 | -1,2 |
| 60,1 | 39,9 | 0,320 | 0,088 | 0,503 | 0,064 | 0,024 | 17,84 | 0,022 | 0,064 | -48,5 |

Tabelle 8.349: $K_{x,i}$ des Systems Acetaldehyd und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_A^0 | n_M^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_A/n_M$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 40,8 | 59,2 | 0,033 | 0,355 | 0,595 | 0,013 | 0,005 | 51,21 | 0,013 | 0,229 | -10,9 |
| 49,8 | 50,2 | 0,102 | 0,168 | 0,683 | 0,034 | 0,012 | 39,87 | 0,012 | 0,088 | -0,3 |
| 60,1 | 39,9 | 0,285 | 0,051 | 0,565 | 0,072 | 0,028 | 39,20 | 0,011 | 0,034 | -19,3 |

Tabelle 8.350: $K_{x,i}$ des Systems Acetaldehyd und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 255$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_A^0 | n_M^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_A/n_M$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 49,8 | 50,2 | 0,057 | 0,122 | 0,777 | 0,031 | 0,013 | 111,24 | 0,006 | 0,066 | 1,7 |

Tabelle 8.351: $K_{x,i}$ des Systems Acetaldehyd und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 255$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_A^0 | n_M^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_A/n_M$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 49,8 | 50,2 | 0,060 | 0,125 | 0,771 | 0,031 | 0,013 | 103,09 | 0,007 | 0,069 | 4,0 |

Tabelle 8.352: $K_{x,i}$ des Systems Acetaldehyd und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_A^0 | n_E^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_A/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 21,1 | 77,3 | 0,045 | 0,739 | 0,216 | - | - | 6,55 | - | - | 2,3 |
| 40,3 | 58,5 | 0,165 | 0,452 | 0,363 | 0,014 | 0,007 | 4,88 | 0,047 | 0,626 | -6,0 |
| 50,1 | 48,9 | 0,293 | 0,315 | 0,363 | 0,019 | 0,010 | 3,94 | 0,046 | 0,458 | -11,1 |
| 60,3 | 38,9 | 0,447 | 0,189 | 0,330 | 0,024 | 0,011 | 3,91 | 0,042 | 0,252 | -4,0 |
| 80,2 | 19,4 | 0,769 | 0,071 | 0,140 | 0,014 | 0,007 | 2,58 | 0,051 | 0,235 | -34,3 |

Tabelle 8.353: $K_{x,i}$ des Systems Acetaldehyd und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_A^0 | n_E^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_A/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 21,1 | 77,3 | 0,044 | 0,739 | 0,217 | - | - | 6,65 | - | - | 3,8 |
| 40,3 | 58,5 | 0,157 | 0,448 | 0,374 | 0,014 | 0,007 | 5,31 | 0,045 | 0,597 | -9,3 |
| 50,1 | 48,9 | 0,277 | 0,301 | 0,391 | 0,021 | 0,010 | 4,70 | 0,041 | 0,379 | -12,6 |
| 60,3 | 38,9 | 0,444 | 0,184 | 0,337 | 0,024 | 0,011 | 4,11 | 0,040 | 0,235 | -3,1 |
| 80,2 | 19,4 | 0,763 | 0,053 | 0,159 | 0,017 | 0,008 | 3,95 | 0,035 | 0,150 | -12,2 |

Tabelle 8.354: $K_{x,i}$ des Systems Acetaldehyd und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_A^0 | n_E^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_A/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 40,3 | 58,5 | 0,065 | 0,389 | 0,520 | 0,020 | 0,007 | 20,61 | 0,029 | 0,252 | -0,8 |
| 50,1 | 48,9 | 0,164 | 0,226 | 0,547 | 0,044 | 0,019 | 14,81 | 0,033 | 0,179 | -13,4 |
| 60,3 | 38,9 | 0,342 | 0,095 | 0,474 | 0,063 | 0,026 | 14,59 | 0,027 | 0,084 | 3,4 |

Tabelle 8.355: $K_{x,i}$ des Systems Acetaldehyd und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_A^0 | n_E^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_A/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 40,3 | 58,5 | 0,058 | 0,387 | 0,528 | 0,020 | 0,008 | 23,51 | 0,028 | 0,293 | -11,0 |
| 50,1 | 48,9 | 0,142 | 0,210 | 0,579 | 0,048 | 0,021 | 19,33 | 0,030 | 0,156 | -19,7 |
| 60,3 | 38,9 | 0,345 | 0,098 | 0,470 | 0,062 | 0,025 | 13,95 | 0,027 | 0,085 | 3,1 |

Tabelle 8.356: $K_{x,i}$ des Systems Acetaldehyd und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 255$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_A^0 | n_E^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_A/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 50,1 | 48,9 | 0,104 | 0,173 | 0,654 | 0,046 | 0,023 | 36,39 | 0,018 | 0,134 | -24,4 |

Tabelle 8.357: $K_{x,i}$ des Systems Acetaldehyd und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 255$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_A^0 | n_E^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_A/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 50,1 | 48,9 | 0,067 | 0,142 | 0,718 | 0,049 | 0,025 | 75,49 | 0,013 | 0,099 | -41,6 |

Tabelle 8.358: $K_{x,i}$ des Systems Acetaldehyd und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_A^0 | n_{1-P}^0 | x_A | x_{1-P} | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_A/n_{1P}$ |
|---------|-------------|-------|-----------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|---------------------|
| 25,7 | 73,6 | 0,059 | 0,671 | 0,270 | - | - | 6,86 | - | - | 12,8 |
| 42,0 | 57,4 | 0,178 | 0,428 | 0,371 | 0,016 | 0,007 | 4,85 | 0,049 | 0,494 | -1,6 |
| 50,3 | 49,2 | 0,289 | 0,313 | 0,367 | 0,022 | 0,009 | 4,07 | 0,050 | 0,371 | -6,2 |
| 60,0 | 39,6 | 0,446 | 0,207 | 0,312 | 0,025 | 0,010 | 3,38 | 0,053 | 0,277 | -11,7 |
| 80,3 | 19,5 | 0,767 | 0,072 | 0,138 | 0,016 | 0,007 | 2,49 | 0,060 | 0,235 | -31,3 |

Tabelle 8.359: $K_{x,i}$ des Systems Acetaldehyd und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_A^0 | n_{1-P}^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_A/n_{1P}$ |
|---------|-------------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|---------------------|
| 25,7 | 73,6 | 0,080 | 0,678 | 0,242 | - | - | 4,47 | - | - | 50,4 |
| 42,0 | 57,4 | 0,177 | 0,428 | 0,371 | 0,016 | 0,007 | 4,90 | 0,050 | 0,512 | -3,4 |
| 50,3 | 49,2 | 0,278 | 0,304 | 0,385 | 0,023 | 0,010 | 4,56 | 0,047 | 0,347 | -7,3 |
| 60,0 | 39,6 | 0,434 | 0,194 | 0,333 | 0,028 | 0,012 | 3,97 | 0,048 | 0,253 | -9,2 |
| 80,3 | 19,5 | 0,762 | 0,055 | 0,157 | 0,018 | 0,008 | 3,75 | 0,041 | 0,161 | -12,6 |

Tabelle 8.360: $K_{x,i}$ des Systems Acetaldehyd und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_A^0 | n_{1-P}^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_A/n_{1P}$ |
|---------|-------------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|---------------------|
| 42,0 | 58,4 | 0,072 | 0,374 | 0,521 | 0,025 | 0,008 | 19,25 | 0,034 | 0,223 | 0,5 |
| 50,3 | 49,2 | 0,166 | 0,228 | 0,542 | 0,047 | 0,017 | 14,33 | 0,037 | 0,148 | -3,9 |
| 60,0 | 39,6 | 0,333 | 0,115 | 0,455 | 0,068 | 0,029 | 11,87 | 0,038 | 0,108 | -5,9 |

Tabelle 8.361: $K_{x,i}$ des Systems Acetaldehyd und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_A^0 | n_{1-P}^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_A/n_{1P}$ |
|---------|-------------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|---------------------|
| 42,0 | 58,4 | 0,074 | 0,375 | 0,518 | 0,024 | 0,008 | 18,57 | 0,034 | 0,238 | 2,8 |
| 50,3 | 49,2 | 0,159 | 0,224 | 0,551 | 0,048 | 0,017 | 15,47 | 0,036 | 0,145 | -5,8 |
| 60,0 | 39,6 | 0,326 | 0,108 | 0,466 | 0,069 | 0,030 | 13,17 | 0,034 | 0,102 | -3,7 |

Tabelle 8.362: $K_{x,i}$ des Systems Acetaldehyd und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 255$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_A^0 | n_{1-P}^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_A/n_{1P}$ |
|---------|-------------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|---------------------|
| 50,3 | 49,2 | 0,089 | 0,171 | 0,662 | 0,054 | 0,024 | 43,68 | 0,021 | 0,114 | -5,4 |

Tabelle 8.363: $K_{x,i}$ des Systems Acetaldehyd und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 255$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_A^0 | n_{1-P}^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_A/n_{1P}$ |
|---------|-------------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|---------------------|
| 50,3 | 49,2 | 0,084 | 0,167 | 0,669 | 0,056 | 0,023 | 47,38 | 0,021 | 0,104 | -7,5 |

8.1.4.2 Systeme mit Propanal

Tabelle 8.364: $K_{x,i}$ des Systems Propanal und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_P^0 | n_M^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | x_{VA} | x_W | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $K_{x,VA}$ | $\Delta n_P/n_M$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|----------|-------|-------------|-------------|-------------|------------|------------------|
| 9,8 | 89,9 | 0,006 | 0,875 | 0,086 | - | - | 0,017 | 0,017 | 16,66 | - | - | 0,004 | 2,0 |
| 24,0 | 75,3 | 0,028 | 0,681 | 0,272 | - | - | 0,010 | 0,010 | 14,32 | - | - | 0,000 | 3,1 |
| 48,9 | 49,6 | 0,215 | 0,255 | 0,508 | 0,015 | 0,007 | - | - | 9,25 | 0,015 | 0,233 | - | 5,6 |
| 72,3 | 25,5 | 0,653 | 0,056 | 0,262 | 0,019 | 0,009 | - | - | 7,21 | 0,015 | 0,104 | - | -3,7 |
| 87,1 | 10,2 | 0,883 | 0,016 | 0,088 | 0,009 | 0,004 | - | - | 6,29 | 0,018 | 0,090 | - | -21,0 |

Tabelle 8.365: $K_{x,i}$ des Systems Propanal und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_P^0 | n_M^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | x_{VA} | x_W | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $K_{x,VA}$ | $\Delta n_P/n_M$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|----------|-------|-------------|-------------|-------------|------------|------------------|
| 9,8 | 89,9 | 0,008 | 0,876 | 0,084 | - | - | 0,016 | 0,016 | 12,85 | - | - | 0,004 | 38,2 |
| 24,0 | 75,3 | 0,032 | 0,683 | 0,266 | - | - | 0,009 | 0,009 | 12,11 | - | - | 0,000 | 17,9 |
| 48,9 | 49,6 | 0,223 | 0,262 | 0,494 | 0,014 | 0,007 | - | - | 8,45 | 0,015 | 0,243 | - | 7,3 |
| 72,3 | 25,5 | 0,653 | 0,054 | 0,264 | 0,020 | 0,010 | - | - | 7,50 | 0,015 | 0,100 | - | -0,8 |
| 87,1 | 10,2 | 0,882 | 0,013 | 0,091 | 0,009 | 0,005 | - | - | 8,14 | 0,014 | 0,069 | - | -3,4 |

Tabelle 8.366: $K_{x,i}$ des Systems Propanal und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_P^0 | n_M^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_P/n_M$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 39,4 | 59,4 | 0,040 | 0,382 | 0,563 | 0,009 | 0,005 | 36,72 | 0,011 | 0,334 | -3,6 |
| 48,5 | 50,0 | 0,114 | 0,193 | 0,654 | 0,025 | 0,014 | 29,66 | 0,011 | 0,163 | -8,7 |
| 59,8 | 38,3 | 0,338 | 0,058 | 0,534 | 0,050 | 0,021 | 27,41 | 0,010 | 0,045 | -8,0 |

Tabelle 8.367: $K_{x,i}$ des Systems Propanal und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_P^0 | n_M^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_P/n_M$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 39,4 | 59,4 | 0,030 | 0,375 | 0,581 | 0,010 | 0,004 | 52,13 | 0,011 | 0,294 | -25,8 |
| 48,5 | 50,0 | 0,104 | 0,184 | 0,673 | 0,026 | 0,013 | 35,22 | 0,011 | 0,141 | -13,0 |
| 59,8 | 38,3 | 0,335 | 0,053 | 0,541 | 0,049 | 0,021 | 30,18 | 0,009 | 0,043 | -1,9 |

Tabelle 8.368: $K_{x,i}$ des Systems Propanal und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 255$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_P^0 | n_M^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_P/n_M$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 48,5 | 50,0 | 0,072 | 0,142 | 0,754 | 0,021 | 0,010 | 73,23 | 0,005 | 0,089 | -4,4 |

Tabelle 8.369: $K_{x,i}$ des Systems Propanal und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 255$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_P^0 | n_M^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_P/n_M$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 48,5 | 50,0 | 0,064 | 0,135 | 0,768 | 0,022 | 0,011 | 88,52 | 0,005 | 0,087 | -11,7 |

Tabelle 8.370: $K_{x,i}$ des Systems Propanal und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_P^0 | n_E^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_P/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 10,0 | 87,9 | 0,017 | 0,888 | 0,095 | - | - | 6,25 | - | - | -24,8 |
| 23,0 | 74,8 | 0,058 | 0,713 | 0,226 | 0,003 | - | 5,43 | 0,038 | - | -8,7 |
| 47,3 | 50,2 | 0,279 | 0,349 | 0,350 | 0,014 | 0,008 | 3,59 | 0,040 | 0,554 | -11,6 |
| 75,6 | 21,7 | 0,727 | 0,079 | 0,171 | 0,015 | 0,007 | 3,00 | 0,041 | 0,216 | -9,9 |
| 86,3 | 10,8 | 0,876 | 0,028 | 0,082 | 0,008 | 0,005 | 3,33 | 0,035 | 0,192 | -12,2 |

Tabelle 8.371: $K_{x,i}$ des Systems Propanal und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_P^0 | n_E^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_P/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 10,0 | 87,9 | - | - | - | - | - | | - | - | - |
| 23,0 | 74,8 | 0,043 | 0,709 | 0,245 | 0,003 | - | 8,08 | 0,035 | - | -33,5 |
| 47,3 | 50,2 | 0,261 | 0,335 | 0,380 | 0,016 | 0,008 | 4,35 | 0,037 | 0,456 | -13,2 |
| 75,6 | 21,7 | 0,725 | 0,073 | 0,179 | 0,015 | 0,008 | 3,39 | 0,035 | 0,207 | -3,4 |
| 86,3 | 10,8 | 0,876 | 0,027 | 0,084 | 0,009 | 0,005 | 3,62 | 0,032 | 0,171 | -3,2 |

Tabelle 8.372: $K_{x,i}$ des Systems Propanal und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_P^0 | n_E^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_P/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 38,8 | 58,8 | 0,081 | 0,425 | 0,471 | 0,015 | 0,008 | 13,74 | 0,029 | 0,462 | -17,7 |
| 49,5 | 48,0 | 0,186 | 0,221 | 0,547 | 0,032 | 0,014 | 13,25 | 0,024 | 0,172 | 0,3 |
| 58,2 | 39,2 | 0,346 | 0,113 | 0,478 | 0,042 | 0,021 | 12,19 | 0,021 | 0,118 | 8,4 |

Tabelle 8.373: $K_{x,i}$ des Systems Propanal und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_P^0 | n_E^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_P/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 38,8 | 58,8 | 0,037 | 0,400 | 0,537 | 0,017 | 0,009 | 36,05 | 0,024 | 0,386 | -59,8 |
| 49,5 | 49,0 | 0,173 | 0,225 | 0,556 | 0,033 | 0,013 | 14,32 | 0,024 | 0,163 | -8,6 |
| 58,2 | 40,0 | 0,340 | 0,123 | 0,475 | 0,042 | 0,021 | 11,36 | 0,023 | 0,127 | -0,7 |

Tabelle 8.374: $K_{x,i}$ des Systems Propanal und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 255$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_P^0 | n_E^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_P/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 49,5 | 49,0 | 0,127 | 0,184 | 0,641 | 0,031 | 0,017 | 27,49 | 0,014 | 0,160 | -10,3 |

Tabelle 8.375: $K_{x,i}$ des Systems Propanal und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 255$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_P^0 | n_E^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_P/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 49,5 | 49,0 | 0,117 | 0,168 | 0,669 | 0,031 | 0,014 | 33,90 | 0,012 | 0,118 | -10,1 |

Tabelle 8.376: $K_{x,i}$ des Systems Propanal und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Aldehyd

| n_P^0 | n_{1-P}^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_P/n_{1P}$ |
|---------|-------------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|---------------------|
| 9,7 | 89,1 | 0,014 | 0,893 | 0,093 | - | - | 7,24 | - | - | -19,5 |
| 23,9 | 74,6 | 0,064 | 0,703 | 0,230 | 0,003 | - | 5,09 | 0,044 | - | -18,0 |
| 49,1 | 48,9 | 0,289 | 0,314 | 0,376 | 0,014 | 0,007 | 4,15 | 0,030 | 0,425 | 14,5 |
| 72,5 | 25,0 | 0,671 | 0,082 | 0,221 | 0,017 | 0,009 | 4,01 | 0,029 | 0,193 | 23,5 |
| 86,6 | 10,6 | 0,879 | 0,026 | 0,083 | 0,008 | 0,004 | 3,60 | 0,031 | 0,170 | 3,2 |

Tabelle 8.377: $K_{x,i}$ des Systems Propanal und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Alkohol

| n_P^0 | n_{1-P}^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_P/n_{1P}$ |
|---------|-------------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|---------------------|
| 9,7 | 89,1 | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 23,9 | 74,6 | 0,030 | 0,694 | 0,272 | 0,004 | - | 13,02 | 0,036 | - | -60,4 |
| 49,1 | 48,9 | 0,306 | 0,329 | 0,346 | 0,013 | 0,006 | 3,45 | 0,035 | 0,483 | 16,6 |
| 72,5 | 25,0 | 0,676 | 0,095 | 0,205 | 0,015 | 0,009 | 3,21 | 0,034 | 0,259 | 8,6 |
| 86,6 | 10,6 | 0,879 | 0,026 | 0,082 | 0,008 | 0,004 | 3,54 | 0,030 | 0,182 | 0,3 |

Tabelle 8.378: $K_{x,i}$ des Systems Propanal und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Aldehyd

| n_P^0 | n_{1-P}^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_P/n_{1P}$ |
|---------|-------------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|---------------------|
| 38,6 | 59,6 | 0,072 | 0,423 | 0,486 | 0,014 | 0,005 | 15,95 | 0,025 | 0,306 | -0,3 |
| 48,1 | 49,9 | 0,155 | 0,248 | 0,548 | 0,034 | 0,015 | 14,26 | 0,028 | 0,193 | 1,7 |
| 58,3 | 39,5 | 0,256 | 0,326 | 0,363 | 0,039 | 0,015 | 4,34 | 0,097 | 0,353 | -69,7 |

Tabelle 8.379: $K_{x,i}$ des Systems Propanal und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Alkohol

| n_P^0 | n_{1-P}^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_P/n_{1P}$ |
|---------|-------------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|---------------------|
| 38,6 | 59,6 | 0,071 | 0,422 | 0,489 | 0,014 | 0,005 | 16,24 | 0,024 | 0,295 | -0,4 |
| 48,1 | 49,9 | 0,159 | 0,252 | 0,541 | 0,034 | 0,014 | 13,51 | 0,029 | 0,192 | 3,4 |
| 58,3 | 39,5 | 0,348 | 0,128 | 0,453 | 0,051 | 0,020 | 10,19 | 0,032 | 0,111 | 5,1 |

8.1.4.3 Systeme mit Butanal

Tabelle 8.380: $K_{x,i}$ des Systems Butanal und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Aldehyd

| n_B^0 | n_M^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_B/n_M$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 39,7 | 59,9 | 0,129 | 0,440 | 0,419 | 0,007 | 0,005 | 7,38 | 0,018 | 0,726 | -12,4 |
| 49,6 | 49,9 | 0,243 | 0,272 | 0,466 | 0,013 | 0,006 | 7,04 | 0,017 | 0,257 | -1,3 |
| 59,4 | 40,0 | 0,409 | 0,154 | 0,414 | 0,016 | 0,007 | 6,58 | 0,014 | 0,171 | 3,8 |

Tabelle 8.381: $K_{x,i}$ des Systems Butanal und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_B^0 | n_M^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_B/n_M$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 39,7 | 59,9 | 0,101 | 0,425 | 0,460 | 0,008 | 0,006 | 10,71 | 0,016 | 0,696 | -28,6 |
| 49,6 | 49,9 | 0,241 | 0,271 | 0,469 | 0,013 | 0,006 | 7,18 | 0,016 | 0,251 | -0,8 |
| 59,4 | 40,0 | 0,413 | 0,158 | 0,407 | 0,016 | 0,007 | 6,25 | 0,015 | 0,175 | 3,5 |

Tabelle 8.382: $K_{x,i}$ des Systems Butanal und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_B^0 | n_M^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_B/n_M$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 39,7 | 59,9 | 0,042 | 0,380 | 0,566 | 0,008 | 0,004 | 35,15 | 0,009 | 0,305 | 2,5 |
| 49,6 | 49,9 | 0,129 | 0,179 | 0,658 | 0,025 | 0,010 | 28,57 | 0,010 | 0,108 | 4,6 |
| 59,4 | 40,0 | 0,321 | 0,065 | 0,558 | 0,039 | 0,017 | 26,71 | 0,008 | 0,051 | 10,0 |

Tabelle 8.383: $K_{x,i}$ des Systems Butanal und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_B^0 | n_M^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_B/n_M$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 39,7 | 59,9 | 0,047 | 0,383 | 0,558 | 0,008 | 0,004 | 31,22 | 0,010 | 0,324 | 12,3 |
| 49,6 | 49,9 | 0,133 | 0,181 | 0,653 | 0,023 | 0,010 | 27,12 | 0,010 | 0,114 | 6,4 |
| 59,4 | 40,0 | 0,325 | 0,070 | 0,549 | 0,039 | 0,017 | 24,16 | 0,009 | 0,054 | 4,1 |

Tabelle 8.384: $K_{x,i}$ des Systems Butanal und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 255$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_B^0 | n_M^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_B/n_M$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 49,6 | 49,9 | 0,070 | 0,125 | 0,768 | 0,026 | 0,011 | 87,63 | 0,005 | 0,072 | 3,9 |

Tabelle 8.385: $K_{x,i}$ des Systems Butanal und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 255$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_B^0 | n_M^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_B/n_M$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 49,6 | 49,9 | 0,080 | 0,128 | 0,760 | 0,023 | 0,010 | 74,54 | 0,005 | 0,071 | 18,8 |

Tabelle 8.386: $K_{x,i}$ des Systems Butanal und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_B^0 | n_E^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_B/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 19,8 | 78,4 | 0,054 | 0,761 | 0,185 | | | 4,49 | | | -2,4 |
| 39,2 | 59,2 | 0,188 | 0,469 | 0,336 | 0,007 | | 3,82 | 0,029 | | 16,0 |
| 49,3 | 49,2 | 0,318 | 0,340 | 0,324 | 0,011 | 0,006 | 3,00 | 0,037 | 0,546 | 0,1 |
| 58,2 | 39,4 | 0,465 | 0,234 | 0,282 | 0,013 | 0,006 | 2,60 | 0,039 | 0,366 | -7,4 |
| 79,6 | 19,2 | 0,770 | 0,068 | 0,147 | 0,010 | 0,005 | 2,81 | 0,031 | 0,233 | 5,5 |

Tabelle 8.387: $K_{x,i}$ des Systems Butanal und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_B^0 | n_E^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_B/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 19,8 | 78,4 | 0,053 | 0,761 | 0,187 | | | 4,67 | | | -2,0 |
| 39,2 | 59,2 | 0,210 | 0,483 | 0,301 | 0,006 | | 2,97 | 0,033 | | 23,5 |
| 49,3 | 49,2 | 0,318 | 0,339 | 0,327 | 0,011 | 0,006 | 3,04 | 0,035 | 0,541 | 1,1 |
| 58,2 | 39,4 | 0,456 | 0,222 | 0,301 | 0,014 | 0,006 | 2,97 | 0,035 | 0,296 | -6,2 |
| 79,6 | 19,2 | 0,771 | 0,068 | 0,148 | 0,009 | 0,005 | 2,80 | 0,027 | 0,242 | 0,0 |

Tabelle 8.388: $K_{x,i}$ des Systems Butanal und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_B^0 | n_E^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_B/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 39,2 | 59,2 | 0,092 | 0,418 | 0,473 | 0,014 | 0,003 | 12,23 | 0,026 | 0,191 | -6,1 |
| 49,3 | 49,2 | 0,189 | 0,236 | 0,537 | 0,026 | 0,012 | 12,04 | 0,021 | 0,196 | 6,3 |
| 58,2 | 39,4 | 0,353 | 0,119 | 0,471 | 0,040 | 0,017 | 11,22 | 0,021 | 0,111 | 3,5 |

Tabelle 8.389: $K_{x,i}$ des Systems Butanal und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_B^0 | n_E^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_B/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 39,2 | 59,2 | 0,075 | 0,411 | 0,496 | 0,014 | 0,005 | 16,04 | 0,023 | 0,268 | -22,0 |
| 49,3 | 49,2 | 0,198 | 0,247 | 0,517 | 0,028 | 0,012 | 10,60 | 0,025 | 0,202 | 9,2 |
| 58,2 | 39,4 | 0,355 | 0,122 | 0,466 | 0,040 | 0,017 | 10,76 | 0,023 | 0,111 | 0,6 |

Tabelle 8.390: $K_{x,i}$ des Systems Butanal und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 255$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_B^0 | n_E^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_B/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 49,3 | 49,2 | 0,109 | 0,167 | 0,679 | 0,029 | 0,016 | 37,21 | 0,011 | 0,130 | 10,7 |

Tabelle 8.391: $K_{x,i}$ des Systems Butanal und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 255$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_B^0 | n_E^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_B/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 49,3 | 49,2 | 0,126 | 0,174 | 0,663 | 0,023 | 0,013 | 30,19 | 0,009 | 0,146 | 22,2 |

Tabelle 8.392: $K_{x,i}$ des Systems Butanal und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_B^0 | n_{1-P}^0 | x_B | x_{1-P} | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_B/n_{1-P}$ |
|---------|-------------|-------|-----------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|----------------------|
| 20,0 | 80,0 | 0,055 | 0,764 | 0,181 | - | - | 4,31 | - | - | -20,0 |
| 40,0 | 60,0 | 0,207 | 0,480 | 0,305 | 0,008 | - | 3,07 | 0,042 | - | -15,9 |
| 50,0 | 50,0 | 0,313 | 0,334 | 0,337 | 0,012 | 0,004 | 3,22 | 0,036 | 0,363 | 5,5 |
| 60,1 | 39,9 | 0,466 | 0,220 | 0,295 | 0,013 | 0,005 | 2,88 | 0,033 | 0,303 | 1,3 |
| 80,0 | 20,0 | 0,764 | 0,077 | 0,145 | 0,010 | 0,005 | 2,47 | 0,035 | 0,264 | -12,0 |

Tabelle 8.393: $K_{x,i}$ des Systems Butanal und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_B^0 | n_{1-P}^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_B/n_{1-P}$ |
|---------|-------------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|----------------------|
| 20,0 | 80,0 | 0,021 | 0,755 | 0,224 | - | - | 13,96 | - | - | -69,7 |
| 40,0 | 60,0 | 0,178 | 0,461 | 0,351 | 0,010 | - | 4,29 | 0,036 | - | -25,6 |
| 50,0 | 50,0 | 0,318 | 0,339 | 0,327 | 0,012 | 0,004 | 3,04 | 0,038 | 0,360 | 5,9 |
| 60,1 | 39,9 | 0,467 | 0,221 | 0,293 | 0,013 | 0,005 | 2,84 | 0,033 | 0,316 | 1,2 |
| 80,0 | 20,0 | 0,763 | 0,071 | 0,151 | 0,010 | 0,005 | 2,81 | 0,031 | 0,232 | -4,8 |

Tabelle 8.394: $K_{x,i}$ des Systems Butanal und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_B^0 | n_{1-P}^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_B/n_{1-P}$ |
|---------|-------------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|----------------------|
| 40,0 | 60,0 | 0,084 | 0,402 | 0,502 | 0,013 | 0,000 | 14,92 | 0,020 | 0,000 | 10,3 |
| 50,0 | 50,0 | 0,181 | 0,233 | 0,545 | 0,030 | 0,011 | 12,94 | 0,023 | 0,160 | 9,0 |
| 60,1 | 39,9 | 0,362 | 0,111 | 0,470 | 0,042 | 0,015 | 11,69 | 0,021 | 0,086 | 20,3 |

Tabelle 8.395: $K_{x,i}$ des Systems Butanal und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_B^0 | n_{1-P}^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_B/n_{1-P}$ |
|---------|-------------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|----------------------|
| 40,0 | 60,0 | 0,109 | 0,418 | 0,461 | 0,012 | - | 10,15 | 0,024 | - | 37,5 |
| 50,0 | 50,0 | 0,195 | 0,245 | 0,521 | 0,028 | 0,011 | 10,90 | 0,025 | 0,179 | 12,9 |
| 60,1 | 39,9 | 0,373 | 0,126 | 0,445 | 0,041 | 0,015 | 9,46 | 0,026 | 0,102 | 10,5 |

Tabelle 8.396: $K_{x,i}$ des Systems Butanal und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 255$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_B^0 | n_{1-P}^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_B/n_{1-P}$ |
|---------|-------------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|----------------------|
| 50,0 | 50,0 | 0,104 | 0,162 | 0,689 | 0,032 | 0,013 | 40,86 | 0,011 | 0,096 | 16,1 |

Tabelle 8.397: $K_{x,i}$ des Systems Butanal und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 255$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_B^0 | n_{1-P}^0 | x_B | x_{1-P} | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_B/n_{1-P}$ |
|---------|-------------|-------|-----------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|----------------------|
| 50,0 | 50,0 | 0,135 | 0,180 | 0,649 | 0,027 | 0,009 | 26,85 | 0,012 | 0,090 | 38,9 |

8.1.4.4 Systeme mit Heptanal

Tabelle 8.398: $K_{x,i}$ des Systems Heptanal und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_H^0 | n_M^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_H/n_M$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 9,7 | 90,0 | 0,009 | 0,893 | 0,098 | - | - | 11,93 | - | - | -32,9 |
| 24,0 | 75,3 | 0,035 | 0,693 | 0,272 | - | - | 11,21 | - | - | -1,5 |
| 48,6 | 49,9 | 0,237 | 0,279 | 0,467 | 0,011 | 0,005 | 7,06 | 0,015 | 0,288 | -2,8 |
| 71,0 | 26,8 | 0,626 | 0,059 | 0,294 | 0,014 | 0,008 | 8,01 | 0,010 | 0,110 | 16,2 |
| 87,7 | 9,6 | 0,891 | 0,012 | 0,090 | 0,006 | - | 8,22 | 0,009 | - | 19,4 |

Tabelle 8.399: $K_{x,i}$ des Systems Heptanal und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_H^0 | n_M^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_H/n_M$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 9,7 | 90,0 | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 24,0 | 75,3 | 0,034 | 0,693 | 0,274 | - | - | 11,74 | - | - | 0,8 |
| 48,6 | 49,9 | 0,232 | 0,274 | 0,477 | 0,011 | 0,005 | 7,51 | 0,014 | 0,276 | -3,9 |
| 71,0 | 26,8 | 0,635 | 0,062 | 0,282 | 0,013 | 0,008 | 7,17 | 0,010 | 0,137 | 8,0 |
| 87,7 | 9,6 | 0,891 | 0,013 | 0,089 | 0,006 | - | 7,44 | 0,010 | - | -0,4 |

Tabelle 8.400: $K_{x,i}$ des Systems Heptanal und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_H^0 | n_M^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_H/n_M$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 39,0 | 59,8 | 0,038 | 0,373 | 0,589 | - | - | 41,70 | - | - | 25,7 |
| 48,7 | 49,8 | 0,102 | 0,137 | 0,746 | 0,015 | 0,000 | 53,08 | 0,004 | 0,000 | 81,6 |
| 58,4 | 39,8 | 0,361 | 0,104 | 0,494 | 0,041 | 0,000 | 13,23 | 0,017 | 0,000 | -55,4 |

Tabelle 8.401: $K_{x,i}$ des Systems Heptanal und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_H^0 | n_M^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_H/n_M$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 39,0 | 59,8 | 0,084 | 0,403 | 0,513 | - | - | 15,17 | - | - | 158,5 |
| 48,7 | 49,8 | 0,187 | 0,205 | 0,609 | 0,000 | 0,000 | 15,95 | 0,000 | - | 123,4 |
| 58,4 | 39,8 | 0,322 | 0,054 | 0,576 | 0,048 | 0,000 | 33,36 | 0,008 | - | -24,5 |

Tabelle 8.402: $K_{x,i}$ des Systems Heptanal und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_H^0 | n_E^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_H/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 10,0 | 87,9 | 0,018 | 0,888 | 0,094 | - | - | 5,92 | - | - | 9,9 |
| 24,0 | 73,8 | 0,077 | 0,700 | 0,223 | - | - | 4,13 | - | - | -17,2 |
| 48,5 | 49,0 | 0,318 | 0,334 | 0,339 | 0,010 | - | 3,19 | - | - | 6,3 |
| 70,0 | 27,2 | 0,646 | 0,111 | 0,226 | 0,012 | 0,005 | 3,14 | 0,026 | 0,220 | 7,6 |
| 86,6 | 9,5 | 0,891 | 0,017 | 0,083 | 0,006 | 0,003 | 5,39 | 0,015 | 0,101 | 71,3 |

Tabelle 8.403: $K_{x,i}$ des Systems Heptanal und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_H^0 | n_E^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_H/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 10,0 | 87,9 | 0,026 | 0,889 | 0,085 | - | - | 3,72 | - | - | 54,5 |
| 24,0 | 73,8 | 0,044 | 0,690 | 0,267 | - | - | 8,83 | - | - | -51,3 |
| 48,5 | 49,0 | 0,324 | 0,340 | 0,326 | 0,009 | - | 2,95 | - | - | 6,3 |
| 70,0 | 27,2 | 0,648 | 0,116 | 0,219 | 0,012 | 0,005 | 2,92 | 0,028 | 0,235 | 4,0 |
| 86,6 | 9,5 | 0,892 | 0,026 | 0,074 | 0,005 | 0,003 | 3,16 | 0,026 | 0,192 | 11,9 |

Tabelle 8.404: $K_{x,i}$ des Systems Heptanal und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Aldehyd

| n_H^0 | n_E^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_H/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 38,6 | 59,0 | 0,081 | 0,398 | 0,521 | - | - | 16,22 | - | - | 27,6 |
| 48,2 | 49,3 | 0,155 | 0,219 | 0,592 | 0,022 | 0,012 | 17,46 | 0,014 | 0,195 | 38,8 |
| 58,3 | 39,1 | 0,331 | 0,078 | 0,535 | 0,037 | 0,019 | 20,84 | 0,010 | 0,072 | 96,2 |

Tabelle 8.405: $K_{x,i}$ des Systems Heptanal und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Alkohol

| n_H^0 | n_E^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_H/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 38,6 | 59,0 | 0,125 | 0,427 | 0,448 | - | - | 8,42 | - | - | 79,4 |
| 48,2 | 49,3 | 0,200 | 0,258 | 0,511 | 0,020 | 0,010 | 9,88 | 0,019 | 0,264 | 48,5 |
| 58,3 | 39,1 | 0,371 | 0,127 | 0,454 | 0,032 | 0,016 | 9,67 | 0,019 | 0,145 | 36,1 |

Tabelle 8.406: $K_{x,i}$ des Systems Heptanal und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Aldehyd

| n_H^0 | n_E^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_H/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 48,2 | 49,3 | 0,106 | 0,126 | 0,769 | - | - | 57,83 | - | - | 138,2 |

Tabelle 8.407: $K_{x,i}$ des Systems Heptanal und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Alkohol

| n_H^0 | n_E^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_H/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|------------------|
| 48,2 | 49,3 | 0,206 | 0,224 | 0,570 | - | - | 12,34 | - | - | 158,3 |

Tabelle 8.408: $K_{x,i}$ des Systems Heptanal und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Aldehyd

| n_H^0 | n_{1-P}^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_H/n_{1-P}$ |
|---------|-------------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|----------------------|
| 9,4 | 89,4 | 0,019 | 0,897 | 0,084 | - | - | 4,91 | - | - | -27,3 |
| 24,3 | 74,3 | 0,079 | 0,699 | 0,221 | - | - | 3,99 | - | - | -12,1 |
| 48,3 | 49,7 | 0,310 | 0,340 | 0,340 | 0,010 | - | 3,22 | 0,030 | - | 14,7 |
| 71,7 | 25,8 | 0,669 | 0,106 | 0,207 | 0,012 | 0,006 | 2,93 | 0,031 | 0,253 | 9,1 |
| 87,0 | 10,2 | 0,883 | 0,017 | 0,089 | 0,007 | 0,003 | 5,92 | 0,016 | 0,088 | 89,9 |

Tabelle 8.409: $K_{x,i}$ des Systems Heptanal und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Alkohol

| n_H^0 | n_{1-P}^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_H/n_{1-P}$ |
|---------|-------------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|----------------------|
| 9,4 | 89,4 | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 24,3 | 74,3 | 0,061 | 0,693 | 0,246 | - | - | 5,85 | - | - | -30,4 |
| 48,3 | 49,7 | 0,326 | 0,355 | 0,309 | 0,010 | - | 2,67 | 0,036 | - | 15,3 |
| 71,7 | 25,8 | 0,670 | 0,109 | 0,202 | 0,013 | 0,006 | 2,78 | 0,034 | 0,253 | 3,2 |
| 87,0 | 10,2 | 0,885 | 0,029 | 0,078 | 0,005 | 0,002 | 3,04 | 0,025 | 0,163 | 5,2 |

Tabelle 8.410: $K_{x,i}$ des Systems Heptanal und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Aldehyd

| n_H^0 | n_{1-P}^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_H/n_{1-P}$ |
|---------|-------------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|----------------------|
| 38,9 | 59,3 | 0,073 | 0,405 | 0,509 | 0,013 | - | 17,21 | 0,020 | - | 24,5 |
| 48,6 | 49,4 | 0,195 | 0,245 | 0,531 | 0,023 | 0,007 | 11,13 | 0,020 | 0,132 | 73,3 |
| 57,7 | 40,1 | 0,303 | 0,079 | 0,556 | 0,042 | 0,020 | 23,28 | 0,011 | 0,069 | 105,5 |

Tabelle 8.411: $K_{x,i}$ des Systems Heptanal und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Alkohol

| n_H^0 | n_{1-P}^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_H/n_{1-P}$ |
|---------|-------------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|----------------------|
| 38,9 | 59,3 | 0,117 | 0,432 | 0,439 | 0,011 | - | 8,66 | 0,025 | - | 88,4 |
| 48,6 | 49,4 | 0,195 | 0,245 | 0,531 | 0,023 | 0,007 | 11,13 | 0,020 | 0,132 | 73,2 |
| 57,7 | 40,1 | 0,353 | 0,134 | 0,463 | 0,035 | 0,016 | 9,78 | 0,022 | 0,130 | 39,3 |

Tabelle 8.412: $K_{x,i}$ des Systems Heptanal und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Aldehyd

| n_H^0 | n_{1-P}^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_H/n_{1-P}$ |
|---------|-------------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|----------------------|
| 48,6 | 49,4 | 0,086 | 0,139 | 0,737 | 0,038 | - | 61,77 | 0,010 | - | 53,9 |

Tabelle 8.413: $K_{x,i}$ des Systems Heptanal und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Alkohol

| n_H^0 | n_{1-P}^0 | x_A | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_H/n_{1-P}$ |
|---------|-------------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|----------------------|
| 48,6 | 49,4 | 0,132 | 0,182 | 0,649 | 0,036 | - | 26,98 | 0,016 | - | 79,6 |

8.1.4.5 Systeme mit Decanal

Tabelle 8.414: $K_{x,i}$ des Systems Decanal und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Aldehyd

| n_D^0 | n_M^0 | x_D | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $\Delta n_D/n_M$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-------------|-------------|------------------|
| 19,6 | 80,0 | 0,029 | 0,762 | 0,208 | - | 9,31 | - | -16,3 |
| 39,1 | 60,1 | 0,125 | 0,431 | 0,444 | - | 8,25 | - | -10,0 |
| 49,1 | 49,9 | 0,232 | 0,253 | 0,506 | 0,009 | 8,59 | 0,009 | 20,5 |
| 58,8 | 40,0 | 0,413 | 0,150 | 0,424 | 0,013 | 6,84 | 0,011 | -5,7 |
| 78,6 | 19,8 | 0,753 | 0,035 | 0,198 | 0,013 | 7,60 | 0,012 | -15,8 |

Tabelle 8.415: $K_{x,i}$ des Systems Decanal und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Alkohol

| n_D^0 | n_M^0 | x_D | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $\Delta n_D/n_M$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-------------|-------------|------------------|
| 19,6 | 80,0 | - | - | - | - | - | - | - |
| 39,1 | 60,1 | 0,106 | 0,418 | 0,476 | - | 10,76 | - | -22,5 |
| 49,1 | 49,9 | 0,258 | 0,278 | 0,456 | 0,009 | 6,37 | 0,011 | 22,7 |
| 58,8 | 40,0 | 0,408 | 0,145 | 0,431 | 0,015 | 7,26 | 0,012 | -2,5 |
| 78,6 | 19,8 | 0,752 | 0,029 | 0,204 | 0,014 | 9,22 | 0,010 | -4,6 |

Tabelle 8.416: $K_{x,i}$ des Systems Decanal und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_D^0 | n_E^0 | x_D | x_E | x_{HA1} | x_{HA2} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $\Delta n_D/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-------------|-------------|------------------|
| 20,0 | 80,0 | 0,053 | 0,763 | 0,184 | 0,000 | 4,54 | 0,000 | -2,1 |
| 40,2 | 59,8 | 0,213 | 0,471 | 0,315 | 0,000 | 3,14 | 0,000 | -6,9 |
| 50,0 | 50,0 | 0,323 | 0,332 | 0,335 | 0,010 | 3,13 | 0,028 | -1,4 |
| 60,3 | 39,7 | 0,465 | 0,200 | 0,323 | 0,012 | 3,48 | 0,023 | 20,7 |
| 79,4 | 20,6 | 0,762 | 0,082 | 0,157 | | 2,52 | | -21,0 |

Tabelle 8.417: $K_{x,i}$ des Systems Decanal und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_D^0 | n_E^0 | x_D | x_E | x_{HA1} | x_{HA2} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $\Delta n_D/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-------------|-------------|-----------------------|
| 20,0 | 80,0 | 0,049 | 0,762 | 0,189 | - | 5,09 | - | -9,6 |
| 40,2 | 59,8 | 0,203 | 0,464 | 0,332 | 0,000 | 3,52 | 0,000 | -4,5 |
| 50,0 | 50,0 | 0,322 | 0,332 | 0,337 | 0,010 | 3,16 | 0,028 | $-5,17 \cdot 10^{-3}$ |
| 60,3 | 39,7 | 0,478 | 0,218 | 0,293 | 0,011 | 2,81 | 0,027 | 13,0 |
| 79,4 | 20,6 | 0,759 | 0,070 | 0,171 | - | 3,21 | - | -8,6 |

Tabelle 8.418: $K_{x,i}$ des Systems Decanal und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_D^0 | n_E^0 | x_D | x_E | x_{HA1} | x_{HA2} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $\Delta n_D/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-------------|-------------|------------------|
| 40,2 | 59,8 | 0,090 | 0,388 | 0,521 | - | 14,85 | - | 14,9 |
| 50,0 | 50,0 | 0,189 | 0,189 | 0,621 | - | 17,30 | - | 41,1 |
| 60,3 | 39,7 | 0,363 | 0,071 | 0,528 | 0,038 | 20,55 | 0,010 | 83,2 |

Tabelle 8.419: $K_{x,i}$ des Systems Decanal und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_D^0 | n_E^0 | x_D | x_E | x_{HA1} | x_{HA2} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $\Delta n_D/n_E$ |
|---------|---------|-------|-------|-----------|-----------|-------------|-------------|------------------|
| 40,2 | 59,8 | 0,116 | 0,406 | 0,478 | - | 10,16 | - | 42,7 |
| 50,0 | 50,0 | 0,232 | 0,232 | 0,535 | - | 9,92 | - | 43,2 |
| 60,3 | 39,7 | 0,393 | 0,113 | 0,459 | 0,035 | 10,32 | 0,019 | 24,2 |

Tabelle 8.420: $K_{x,i}$ des Systems Decanal und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_D^0 | n_{1-P}^0 | x_D | x_{1-P} | x_{HA1} | x_{HA2} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $\Delta n_D/n_{1-P}$ |
|---------|-------------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|----------------------|
| 39,3 | 59,3 | 0,211 | 0,477 | 0,312 | - | 3,09 | - | -12,8 |
| 48,3 | 50,2 | 0,309 | 0,346 | 0,335 | 0,010 | 3,13 | 0,032 | 4,1 |
| 58,8 | 39,6 | 0,459 | 0,209 | 0,321 | 0,012 | 3,35 | 0,024 | 11,9 |

Tabelle 8.421: $K_{x,i}$ des Systems Decanal und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Alkohol

| n_D^0 | n_{1-P}^0 | x_D | x_{1-P} | x_{HA1} | x_{HA2} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $\Delta n_D/n_{1-P}$ |
|---------|-------------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|----------------------|
| 39,3 | 59,3 | 0,190 | 0,463 | 0,346 | - | 3,93 | - | -18,7 |
| 48,3 | 50,2 | 0,315 | 0,350 | 0,326 | 0,010 | 2,96 | 0,032 | 7,4 |
| 58,8 | 39,6 | 0,468 | 0,221 | 0,300 | 0,011 | 2,90 | 0,026 | 8,5 |

Tabelle 8.422: $K_{x,i}$ des Systems Decanal und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Aldehyd

| n_D^0 | n_{1-P}^0 | x_D | x_{1-P} | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_D/n_{1-P}$ |
|---------|-------------|-------|-----------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|----------------------|
| 39,3 | 59,3 | 0,082 | 0,392 | 0,527 | - | - | 16,45 | - | - | 15,9 |
| 48,3 | 50,2 | 0,181 | 0,212 | 0,607 | - | - | 15,80 | - | - | 39,5 |
| 58,8 | 39,6 | 0,335 | 0,095 | 0,509 | 0,039 | 0,022 | 16,03 | 0,014 | 0,102 | 38,2 |

Tabelle 8.423: $K_{x,i}$ des Systems Decanal und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Alkohol

| n_D^0 | n_{1-P}^0 | x_D | x_{1-P} | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_D/n_{1-P}$ |
|---------|-------------|-------|-----------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|----------------------|
| 39,3 | 59,3 | 0,113 | 0,412 | 0,475 | - | - | 10,24 | - | - | 51,1 |
| 48,3 | 50,2 | 0,229 | 0,258 | 0,514 | - | - | 8,73 | - | - | 49,7 |
| 58,8 | 39,6 | 0,355 | 0,119 | 0,469 | 0,036 | 0,020 | 11,07 | 0,020 | 0,144 | 16,2 |

8.1.4.6 Systeme mit 2-Chlorbenzaldehyd

Tabelle 8.424: $K_{x,i}$ des Systems 2-Chlorbenzaldehyd und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Aldehyd

| n_{2-C}^0 | n_M^0 | x_{2-C} | x_M | x_{HA1} | x_{VA} | x_W | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,VA}$ | $\Delta n_{2-C}/n_M$ |
|-------------|---------|-----------|-------|-----------|----------|-------|-------------|------------|----------------------|
| 23,9 | 75,6 | 0,098 | 0,558 | 0,031 | 0,156 | 0,156 | 0,567 | 1,411 | -10,8 |
| 39,1 | 60,1 | 0,257 | 0,329 | 0,038 | 0,188 | 0,188 | 0,454 | 2,776 | -18,6 |
| 48,8 | 50,2 | 0,391 | 0,249 | 0,041 | 0,159 | 0,159 | 0,425 | 2,472 | -27,2 |
| 58,9 | 40,0 | 0,543 | 0,263 | 0,066 | 0,064 | 0,064 | 0,460 | 0,238 | -7,2 |
| 72,2 | 26,3 | 0,706 | 0,135 | 0,042 | 0,058 | 0,058 | 0,443 | 0,601 | -23,8 |

Tabelle 8.425: $K_{x,i}$ des Systems 2-Chlorbenzaldehyd und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Alkohol

| n_{2-C}^0 | n_M^0 | x_{2-C} | x_M | x_{HA1} | x_{VA} | x_W | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,VA}$ | $\Delta n_{2-C}/n_M$ |
|-------------|---------|-----------|-------|-----------|----------|-------|-------------|------------|----------------------|
| 23,9 | 75,6 | 0,086 | 0,541 | 0,033 | 0,170 | 0,170 | 0,720 | 1,604 | -19,6 |
| 39,1 | 60,1 | 0,242 | 0,298 | 0,042 | 0,209 | 0,209 | 0,589 | 3,452 | -15,4 |
| 48,8 | 50,2 | 0,376 | 0,210 | 0,047 | 0,183 | 0,183 | 0,597 | 3,405 | -17,0 |
| 58,9 | 40,0 | 0,540 | 0,255 | 0,069 | 0,068 | 0,068 | 0,503 | 0,259 | -5,3 |
| 72,2 | 26,3 | 0,703 | 0,116 | 0,047 | 0,067 | 0,067 | 0,579 | 0,821 | -12,4 |

Tabelle 8.426: $K_{x,i}$ des Systems 2-Chlorbenzaldehyd und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Aldehyd

| n_{2-C}^0 | n_M^0 | x_{2-C} | x_M | x_{HA1} | x_{VA} | x_W | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,VA}$ | $\Delta n_{2-C}/n_M$ |
|-------------|---------|-----------|-------|-----------|----------|-------|-------------|------------|----------------------|
| 38,9 | 59,9 | 0,233 | 0,307 | 0,071 | 0,195 | 0,195 | 0,986 | 1,750 | -38,5 |
| 49,1 | 49,4 | 0,377 | 0,204 | 0,065 | 0,177 | 0,177 | 0,851 | 2,356 | -38,8 |
| 58,8 | 40,0 | 0,515 | 0,177 | 0,087 | 0,110 | 0,110 | 0,953 | 0,782 | -20,1 |

Tabelle 8.427: $K_{x,i}$ des Systems 2-Chlorbenzaldehyd und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Alkohol

| n_{2-C}^0 | n_M^0 | x_{2-C} | x_M | x_{HA1} | x_{VA} | x_W | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,VA}$ | $\Delta n_{2-C}/n_M$ |
|-------------|---------|-----------|-------|-----------|----------|-------|-------------|------------|----------------------|
| 38,9 | 59,9 | 0,195 | 0,236 | 0,086 | 0,241 | 0,241 | 1,868 | 2,870 | -32,9 |
| 49,1 | 49,4 | 0,352 | 0,142 | 0,078 | 0,214 | 0,214 | 1,563 | 4,090 | -22,6 |
| 58,8 | 40,0 | 0,508 | 0,156 | 0,095 | 0,121 | 0,121 | 1,209 | 0,981 | -10,1 |

Tabelle 8.428: $K_{x,i}$ des Systems 2-Chlorbenzaldehyd und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Aldehyd

| n_{2-C}^0 | n_M^0 | x_{2-C} | x_M | x_{HA1} | x_{VA} | x_W | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,VA}$ | $\Delta n_{2-C}/n_M$ |
|-------------|---------|-----------|-------|-----------|----------|-------|-------------|------------|----------------------|
| 49,1 | 49,4 | 0,355 | 0,131 | 0,059 | 0,228 | 0,228 | 1,264 | 6,704 | -61,1 |

Tabelle 8.429: $K_{x,i}$ des Systems 2-Chlorbenzaldehyd und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Alkohol

| n_{2-C}^0 | n_M^0 | x_{2-C} | x_M | x_{HA1} | x_{VA} | x_W | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,VA}$ | $\Delta n_{2-C}/n_M$ |
|-------------|---------|-----------|-------|-----------|----------|-------|-------------|------------|----------------------|
| 49,1 | 49,4 | 0,328 | 0,061 | 0,069 | 0,271 | 0,271 | 3,475 | 17,324 | -22,7 |

Tabelle 8.430: $K_{x,i}$ des Systems 2-Chlorbenzaldehyd und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Aldehyd

| n_{2-C}^0 | n_E^0 | x_{2-C} | x_E | x_{HA1} | x_{VA} | x_W | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,VA}$ | $\Delta n_{2-C}/n_E$ |
|-------------|---------|-----------|-------|-----------|----------|-------|-------------|------------|----------------------|
| 10,2 | 87,7 | 0,034 | 0,821 | 0,011 | 0,067 | 0,067 | 0,393 | 0,504 | -9,1 |
| 23,8 | 74,0 | 0,145 | 0,620 | 0,026 | 0,105 | 0,105 | 0,285 | 0,692 | -10,6 |
| 49,8 | 47,7 | 0,448 | 0,333 | 0,035 | 0,092 | 0,092 | 0,234 | 0,720 | -10,3 |
| 71,1 | 26,2 | 0,708 | 0,142 | 0,023 | 0,063 | 0,063 | 0,229 | 1,224 | -17,4 |
| 87,3 | 9,8 | 0,896 | 0,046 | 0,007 | 0,025 | 0,025 | 0,179 | 1,871 | -38,5 |

Tabelle 8.431: $K_{x,i}$ des Systems 2-Chlorbenzaldehyd und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Alkohol

| n_{2-C}^0 | n_E^0 | x_{2-C} | x_E | x_{HA1} | x_{VA} | x_W | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,VA}$ | $\Delta n_{2-C}/n_E$ |
|-------------|---------|-----------|-------|-----------|----------|-------|-------------|------------|----------------------|
| 10,2 | 87,7 | 0,028 | 0,814 | 0,012 | 0,073 | 0,073 | 0,519 | 0,552 | -23,7 |
| 23,8 | 74,0 | 0,134 | 0,606 | 0,028 | 0,116 | 0,116 | 0,344 | 0,792 | -15,0 |
| 49,8 | 47,7 | 0,444 | 0,321 | 0,038 | 0,099 | 0,099 | 0,266 | 0,798 | -8,2 |
| 71,1 | 26,2 | 0,706 | 0,131 | 0,021 | 0,071 | 0,071 | 0,230 | 1,795 | -11,2 |
| 87,3 | 9,8 | 0,895 | 0,035 | 0,009 | 0,030 | 0,030 | 0,291 | 2,856 | -16,8 |

Tabelle 8.432: $K_{x,i}$ des Systems 2-Chlorbenzaldehyd und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Aldehyd

| n_{2-C}^0 | n_E^0 | x_{2-C} | x_E | x_{HA1} | x_{VA} | x_W | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,VA}$ | $\Delta n_{2-C}/n_E$ |
|-------------|---------|-----------|-------|-----------|----------|-------|-------------|------------|----------------------|
| 39,0 | 58,6 | 0,276 | 0,366 | 0,054 | 0,152 | 0,152 | 0,533 | 1,180 | -7,5 |
| 48,5 | 49,0 | 0,401 | 0,273 | 0,057 | 0,135 | 0,135 | 0,517 | 1,174 | -8,2 |
| 58,3 | 39,1 | 0,533 | 0,188 | 0,049 | 0,115 | 0,115 | 0,493 | 1,422 | -20,2 |

Tabelle 8.433: $K_{x,i}$ des Systems 2-Chlorbenzaldehyd und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Alkohol

| n_{2-C}^0 | n_E^0 | x_{2-C} | x_E | x_{HA1} | x_{VA} | x_W | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,VA}$ | $\Delta n_{2-C}/n_E$ |
|-------------|---------|-----------|-------|-----------|----------|-------|-------------|------------|----------------------|
| 39,0 | 58,6 | 0,270 | 0,355 | 0,056 | 0,160 | 0,160 | 0,580 | 1,295 | -6,5 |
| 48,5 | 49,0 | 0,396 | 0,261 | 0,060 | 0,142 | 0,142 | 0,576 | 1,292 | -5,2 |
| 58,3 | 39,1 | 0,525 | 0,166 | 0,055 | 0,127 | 0,127 | 0,636 | 1,752 | -10,6 |

Tabelle 8.434: $K_{x,i}$ des Systems 2-Chlorbenzaldehyd und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Aldehyd

| n_{2-C}^0 | n_E^0 | x_{2-C} | x_E | x_{HA1} | x_{VA} | x_W | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,VA}$ | $\Delta n_{2-C}/n_E$ |
|-------------|---------|-----------|-------|-----------|----------|-------|-------------|------------|----------------------|
| 48,5 | 49,0 | 0,377 | 0,231 | 0,088 | 0,152 | 0,152 | 1,011 | 1,147 | -16,3 |

Tabelle 8.435: $K_{x,i}$ des Systems 2-Chlorbenzaldehyd und Ethanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Alkohol

| n_{2-C}^0 | n_E^0 | x_{2-C} | x_E | x_{HA1} | x_{VA} | x_W | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,VA}$ | $\Delta n_{2-C}/n_E$ |
|-------------|---------|-----------|-------|-----------|----------|-------|-------------|------------|----------------------|
| 48,5 | 49,0 | 0,366 | 0,207 | 0,095 | 0,166 | 0,166 | 1,250 | 1,402 | -10,1 |

Tabelle 8.436: $K_{x,i}$ des Systems 2-Chlorbenzaldehyd und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Aldehyd

| n_{2-C}^0 | n_{1-P}^0 | x_{2-C} | x_{1-P} | x_{HA1} | x_{VA} | x_W | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,VA}$ | $\Delta n_{2-C}/n_{1-P}$ |
|-------------|-------------|-----------|-----------|-----------|----------|-------|-------------|------------|--------------------------|
| 8,3 | 89,5 | 0,052 | 0,892 | 0,017 | 0,019 | 0,019 | 0,370 | 0,024 | -1,4 |
| 25,1 | 73,4 | 0,179 | 0,648 | 0,031 | 0,071 | 0,071 | 0,270 | 0,250 | -9,9 |
| 48,6 | 49,4 | 0,437 | 0,367 | 0,037 | 0,079 | 0,079 | 0,230 | 0,465 | -8,8 |
| 72,1 | 25,4 | 0,719 | 0,152 | 0,024 | 0,053 | 0,053 | 0,218 | 0,769 | -21,0 |
| 86,7 | 10,5 | 0,889 | 0,067 | 0,013 | 0,016 | 0,016 | 0,225 | 0,272 | -17,9 |

Tabelle 8.437: $K_{x,i}$ des Systems 2-Chlorbenzaldehyd und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Alkohol

| n_{2-C}^0 | n_{1-P}^0 | x_{2-C} | x_{1-P} | x_{HA1} | x_{VA} | x_W | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,VA}$ | $\Delta n_{2-C}/n_{1-P}$ |
|-------------|-------------|-----------|-----------|-----------|----------|-------|-------------|------------|--------------------------|
| 8,3 | 89,5 | 0,051 | 0,892 | 0,017 | 0,020 | 0,020 | 0,380 | 0,025 | -1,2 |
| 25,1 | 73,4 | 0,172 | 0,639 | 0,033 | 0,078 | 0,078 | 0,302 | 0,285 | -12,1 |
| 48,6 | 49,4 | 0,433 | 0,358 | 0,040 | 0,085 | 0,085 | 0,256 | 0,505 | -7,0 |
| 72,1 | 25,4 | 0,716 | 0,137 | 0,027 | 0,060 | 0,060 | 0,274 | 0,977 | -12,2 |
| 86,7 | 10,5 | 0,889 | 0,062 | 0,015 | 0,017 | 0,017 | 0,269 | 0,317 | -13,2 |

Tabelle 8.438: $K_{x,i}$ des Systems 2-Chlorbenzaldehyd und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Aldehyd

| n_{2-C}^0 | n_{1-P}^0 | x_{2-C} | x_{1-P} | x_{HA1} | x_{VA} | x_W | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,VA}$ | $\Delta n_{2-C}/n_{1-P}$ |
|-------------|-------------|-----------|-----------|-----------|----------|-------|-------------|------------|--------------------------|
| 38,9 | 59,3 | 0,265 | 0,350 | 0,050 | 0,167 | 0,167 | 0,541 | 1,598 | -4,3 |
| 48,4 | 49,6 | 0,394 | 0,263 | 0,050 | 0,147 | 0,147 | 0,482 | 1,640 | -2,2 |
| 58,4 | 39,4 | 0,526 | 0,165 | 0,046 | 0,132 | 0,132 | 0,527 | 2,305 | -14,4 |

Tabelle 8.439: $K_{x,i}$ des Systems 2-Chlorbenzaldehyd und 1-Propanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Alkohol

| n_{2-C}^0 | n_{1-P}^0 | x_{2-C} | x_{1-P} | x_{HA1} | x_{VA} | x_W | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,VA}$ | $\Delta n_{2-C}/n_{1-P}$ |
|-------------|-------------|-----------|-----------|-----------|----------|-------|-------------|------------|--------------------------|
| 38,9 | 59,3 | 0,261 | 0,343 | 0,051 | 0,172 | 0,172 | 0,570 | 1,696 | -4,8 |
| 48,4 | 49,6 | 0,393 | 0,259 | 0,051 | 0,149 | 0,149 | 0,499 | 1,686 | -1,9 |
| 58,4 | 39,4 | 0,522 | 0,150 | 0,046 | 0,141 | 0,141 | 0,589 | 2,852 | -7,2 |

8.1.4.7 Systeme mit 3-Phenylpropanal

Tabelle 8.440: $K_{x,i}$ des Systems 3-Phenylpropanal und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Aldehyd

| n_{3-P}^0 | n_M^0 | x_{3-P} | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_{3-P}/n_M$ |
|-------------|---------|-----------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|----------------------|
| 23,0 | 76,3 | 0,022 | 0,705 | 0,272 | - | - | 17,18 | - | - | 1,7 |
| 38,9 | 59,9 | 0,076 | 0,400 | 0,523 | - | - | 17,11 | - | - | 71,3 |
| 48,4 | 50,1 | 0,202 | 0,239 | 0,549 | 0,010 | - | 11,37 | 0,008 | - | 17,0 |
| 74,7 | 23,0 | 0,685 | 0,012 | 0,279 | 0,015 | 0,010 | 35,27 | 0,002 | 0,027 | 320,6 |

Tabelle 8.441: $K_{x,i}$ des Systems 3-Phenylpropanal und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Alkohol

| n_{3-P}^0 | n_M^0 | x_{3-P} | x_M | x_{HA1} | x_{HA2} | x_{HA3} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $K_{x,HA3}$ | $\Delta n_{3-P}/n_M$ |
|-------------|---------|-----------|-------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|-------------|----------------------|
| 23,0 | 76,3 | 0,025 | 0,706 | 0,268 | - | - | 14,93 | - | - | 15,9 |
| 38,9 | 59,9 | 0,181 | 0,468 | 0,352 | - | - | 4,16 | - | - | 247,4 |
| 48,4 | 50,1 | 0,224 | 0,260 | 0,506 | 0,009 | - | 8,68 | 0,009 | - | 18,4 |
| 74,7 | 23,0 | 0,696 | 0,042 | 0,240 | 0,013 | 0,008 | 8,15 | 0,010 | 0,107 | 17,5 |

Tabelle 8.442: $K_{x,i}$ des Systems 3-Phenylpropanal und Methanol in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Aldehyd

| n_{3-P}^0 | n_M^0 | x_{3-P} | x_M | x_{HA1} | $K_{x,HA1}$ | $\Delta n_{3-P}/n_M$ |
|-------------|---------|-----------|--------|-----------|-------------|----------------------|
| 38,6 | 60,2 | 0,028 | 0,377 | 0,595 | 56,53 | 31,2 |
| 48,7 | 49,8 | 0,077 | 0,098 | 0,825 | 109,55 | 264,8 |
| 58,6 | 39,6 | 0,268 | -0,083 | 0,815 | -36,65 | -237,6 |

Tabelle 8.443: $K_{x,i}$ des Systems 3-Phenylpropanal und Methanol
in Abhängigkeit von der Konzentration
bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Alkohol

| n_{3-P}^0 | n_M^0 | x_{3-P} | x_M | x_{HA1} | $K_{x,HA1}$ | $\Delta n_{3-P}/n_M$ |
|-------------|---------|-----------|-------|-----------|-------------|----------------------|
| 38,6 | 60,2 | 0,087 | 0,414 | 0,499 | 13,89 | 268,2 |
| 48,7 | 49,8 | 0,217 | 0,234 | 0,549 | 10,80 | 314,8 |
| 58,6 | 39,6 | 0,480 | 0,231 | 0,289 | 2,60 | -14,1 |

Tabelle 8.444: $K_{x,i}$ des Systems 3-Phenylpropanal und Methanol
in Abhängigkeit von der Konzentration
bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Aldehyd

| n_{3-P}^0 | n_M^0 | x_{3-P} | x_M | x_{HA1} | $K_{x,HA1}$ | $\Delta n_{3-P}/n_M$ |
|-------------|---------|-----------|-------|-----------|-------------|----------------------|
| 48,7 | 49,8 | 0,036 | 0,057 | 0,908 | 449,02 | 445,8 |

Tabelle 8.445: $K_{x,i}$ des Systems 3-Phenylpropanal und Methanol
in Abhängigkeit von der Konzentration
bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Alkohol

| n_{3-P}^0 | n_M^0 | x_{3-P} | x_M | x_{HA1} | $K_{x,HA1}$ | $\Delta n_{3-P}/n_M$ |
|-------------|---------|-----------|-------|-----------|-------------|----------------------|
| 48,7 | 49,8 | 0,187 | 0,205 | 0,607 | 15,77 | 703,7 |

Tabelle 8.446: $K_{x,i}$ des Systems 3-Phenylpropanal und Ethanol in Abhängigkeit
von der Konzentration bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Aldehyd

| n_{3-P}^0 | n_E^0 | x_{3-P} | x_E | x_{HA1} | x_{HA2} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $\Delta n_{3-P}/n_E$ |
|-------------|---------|-----------|-------|-----------|-----------|-------------|-------------|----------------------|
| 23,0 | 74,8 | 0,044 | 0,706 | 0,250 | - | 8,08 | - | 16,6 |
| 38,7 | 58,9 | 0,172 | 0,456 | 0,372 | - | 4,73 | - | 12,2 |
| 51,0 | 46,5 | 0,319 | 0,267 | 0,398 | 0,015 | 4,66 | 0,026 | 14,9 |
| 70,1 | 27,1 | 0,645 | 0,083 | 0,271 | - | 5,05 | - | 44,8 |
| 83,9 | 13,2 | 0,846 | 0,021 | 0,134 | - | 7,63 | - | 48,5 |

Tabelle 8.447: $K_{x,i}$ des Systems 3-Phenylpropanal und Ethanol in Abhängigkeit
von der Konzentration bei $T = 295\text{ K}$, Bezugsgröße Alkohol

| n_{3-P}^0 | n_E^0 | x_{3-P} | x_E | x_{HA1} | x_{HA2} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $\Delta n_{3-P}/n_E$ |
|-------------|---------|-----------|-------|-----------|-----------|-------------|-------------|----------------------|
| 23,0 | 74,8 | 0,069 | 0,714 | 0,217 | - | 4,40 | - | 84,1 |
| 38,7 | 58,9 | 0,193 | 0,470 | 0,337 | - | 3,72 | - | 23,0 |
| 51,0 | 46,5 | 0,333 | 0,281 | 0,372 | 0,014 | 3,97 | 0,029 | 12,3 |
| 70,1 | 27,1 | 0,648 | 0,104 | 0,234 | 0,015 | 3,47 | 0,028 | 16,7 |
| 83,9 | 13,2 | 0,847 | 0,029 | 0,124 | - | 5,08 | - | 6,7 |

Tabelle 8.448: $K_{x,i}$ des Systems 3-Phenylpropanal und Ethanol
in Abhängigkeit von der Konzentration
bei $T = 273$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_{3-P}^0 | n_E^0 | x_{3-P} | x_E | x_{HA1} | $K_{x,HA1}$ | $\Delta n_{3-P}/n_E$ |
|-------------|---------|-----------|-------|-----------|-------------|----------------------|
| 38,7 | 58,9 | 0,078 | 0,394 | 0,528 | 17,14 | 15,3 |
| 48,7 | 48,8 | 0,148 | 0,150 | 0,703 | 31,84 | 149,9 |
| 58,5 | 38,9 | - | - | - | - | - |

Tabelle 8.449: $K_{x,i}$ des Systems 3-Phenylpropanal und Ethanol
in Abhängigkeit von der Konzentration
bei $T = 273$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_{3-P}^0 | n_E^0 | x_{3-P} | x_E | x_{HA1} | $K_{x,HA1}$ | $\Delta n_{3-P}/n_E$ |
|-------------|---------|-----------|-------|-----------|-------------|----------------------|
| 38,7 | 58,9 | 0,108 | 0,414 | 0,478 | 10,66 | 53,2 |
| 48,7 | 48,8 | 0,229 | 0,231 | 0,540 | 10,23 | 344,7 |
| 58,5 | 38,9 | 0,423 | 0,132 | 0,445 | 7,96 | 98,2 |

Tabelle 8.450: $K_{x,i}$ des Systems 3-Phenylpropanal und Ethanol
in Abhängigkeit von der Konzentration
bei $T = 255$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_{3-P}^0 | n_E^0 | x_{3-P} | x_E | x_{HA1} | $K_{x,HA1}$ | $\Delta n_{3-P}/n_E$ |
|-------------|---------|-----------|-------|-----------|-------------|----------------------|
| 48,7 | 48,8 | 0,066 | 0,068 | 0,865 | 190,73 | 444,3 |

Tabelle 8.451: $K_{x,i}$ des Systems 3-Phenylpropanal und Ethanol
in Abhängigkeit von der Konzentration
bei $T = 255$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_{3-P}^0 | n_E^0 | x_{3-P} | x_E | x_{HA1} | $K_{x,HA1}$ | $\Delta n_{3-P}/n_E$ |
|-------------|---------|-----------|-------|-----------|-------------|----------------------|
| 48,7 | 48,8 | 0,230 | 0,231 | 0,539 | 10,13 | 453,2 |

Tabelle 8.452: $K_{x,i}$ des Systems 3-Phenylpropanal und 1-Propanol in Abhängigkeit
von der Konzentration bei $T = 295$ K, Bezugsgröße Aldehyd

| n_{3-P}^0 | n_{1-P}^0 | x_{3-P} | x_{1-P} | x_{HA1} | x_{HA2} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $\Delta n_{3-P}/n_{1-P}$ |
|-------------|-------------|-----------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|--------------------------|
| 9,7 | 89,1 | 0,010 | 0,892 | 0,098 | - | 10,91 | - | -19,9 |
| 24,3 | 74,2 | 0,051 | 0,689 | 0,260 | - | 7,34 | - | 2,0 |
| 50,2 | 47,7 | 0,309 | 0,284 | 0,394 | 0,012 | 4,49 | 0,022 | 10,1 |
| 73,1 | 24,4 | 0,688 | 0,121 | 0,176 | 0,014 | 2,12 | 0,055 | -54,9 |

Tabelle 8.453: $K_{x,i}$ des Systems 3-Phenylpropanal und 1-Propanol in Abhängigkeit
von der Konzentration bei $T = 295$ K, Bezugsgröße Alkohol

| n_{3-P}^0 | n_{1-P}^0 | x_{3-P} | x_{1-P} | x_{HA1} | x_{HA2} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $\Delta n_{3-P}/n_{1-P}$ |
|-------------|-------------|-----------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|--------------------------|
| 9,7 | 89,1 | - | - | - | - | - | - | - |
| 24,3 | 74,2 | 0,054 | 0,689 | 0,256 | - | 6,87 | - | 0,072 |
| 50,2 | 47,7 | 0,322 | 0,298 | 0,368 | 0,011 | 3,84 | - | 0,108 |
| 73,1 | 24,4 | 0,684 | 0,070 | 0,228 | 0,018 | 4,80 | 0,024 | -0,219 |

Tabelle 8.454: $K_{x,i}$ des Systems 3-Phenylpropanal und 1-Propanol
in Abhängigkeit von der Konzentration
bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Aldehyd

| n_{3-P}^0 | n_{1-P}^0 | x_{3-P} | x_{1-P} | x_{HA1} | $K_{x,HA1}$ | $\Delta n_{3-P}/n_{1-P}$ |
|-------------|-------------|-----------|-----------|-----------|-------------|--------------------------|
| 38,9 | 59,3 | 0,056 | 0,381 | 0,563 | 26,37 | 68,0 |
| 49,1 | 48,9 | 0,140 | 0,136 | 0,724 | 38,05 | 191,0 |
| 57,9 | 39,9 | - | - | - | - | - |

Tabelle 8.455: $K_{x,i}$ des Systems 3-Phenylpropanal und 1-Propanol in Abhängigkeit
von der Konzentration bei $T = 273\text{ K}$, Bezugsgröße Alkohol

| n_{3-P}^0 | n_{1-P}^0 | x_{3-P} | x_{1-P} | x_{HA1} | x_{HA2} | $K_{x,HA1}$ | $K_{x,HA2}$ | $\Delta n_{3-P}/n_{1-P}$ |
|-------------|-------------|-----------|-----------|-----------|-----------|-------------|-------------|--------------------------|
| 38,9 | 59,3 | 0,161 | 0,449 | 0,390 | - | 5,41 | - | 3,106 |
| 49,1 | 48,9 | 0,265 | 0,262 | 0,473 | - | 6,80 | - | 1,917 |
| 57,9 | 39,9 | 0,387 | 0,135 | 0,453 | 0,026 | 8,66 | 0,017 | 1,077 |

Tabelle 8.456: $K_{x,i}$ des Systems 3-Phenylpropanal und 1-Propanol
in Abhängigkeit von der Konzentration bei $T = 255\text{ K}$,
Bezugsgröße Aldehyd

| n_{3-P}^0 | n_{1-P}^0 | x_{3-P} | x_{1-P} | x_{HA1} | $K_{x,HA1}$ | $\Delta n_{3-P}/n_{1-P}$ |
|-------------|-------------|-----------|-----------|-----------|-------------|--------------------------|
| 49,1 | 48,9 | 0,075 | 0,072 | 0,853 | 156,99 | 447,3 |

Tabelle 8.457: $K_{x,i}$ des Systems 3-Phenylpropanal und 1-Propanol
in Abhängigkeit von der Konzentration
bei $T = 255\text{ K}$, Bezugsgröße Alkohol

| n_{3-P}^0 | n_{1-P}^0 | x_{3-P} | x_{1-P} | x_{HA1} | $K_{x,HA1}$ | $\Delta n_{3-P}/n_{1-P}$ |
|-------------|-------------|-----------|-----------|-----------|-------------|--------------------------|
| 49,1 | 48,9 | 0,241 | 0,239 | 0,520 | 9,02 | 418,2 |

8.1.5 UNIFAC-Parameter

Tabelle 8.458: Einteilung der untersuchten Stoffe in UNIFAC-Gruppen

| Stoffe | Gruppeneinteilung |
|---|--|
| Acetaldehyd | 1 CHO, 1 CH ₃ |
| Propanal | 1 CHO, 1 CH ₃ , 1 CH ₂ |
| Butanal | 1 CHO, 1 CH ₃ , 2 CH ₂ |
| Heptanal | 1 CHO, 1 CH ₃ , 5 CH ₂ |
| Decanal | 1 CHO, 1 CH ₃ , 8 CH ₂ |
| 2-Phenylpropanal | 1 CHO, 2 CH ₂ , 1 AC, 5ACH |
| 2-Chlorbenzaldehyd | 1 CHO, 1 AC, 4 ACH, 1 ACCl |
| Methanol | CH ₃ OH |
| Ethanol | 1 CH ₃ , 1 CH ₂ , 1 OH |
| 1-Propanol | 1 CH ₃ , 2 CH ₂ , 1 OH |
| Halbacetale | |
| HO(CHOCH ₃) _n CH ₃ | 2 CH ₃ , 1 OH, n CHO; n = 1, 2, 3 |
| HO(CHOCH ₃) _n CH ₂ CH ₃ | 2 CH ₃ , 1 CH ₂ , 1 OH, n CHO; n = 1, 2, 3 |
| HO(CHOCH ₃) _n (CH ₂) ₂ CH ₃ | 2 CH ₃ , 2 CH ₂ , 1 OH, n CHO; n = 1, 2, 3 |
| HO(CHOCH ₂ CH ₃) _n CH ₃ | 2 CH ₃ , 1 CH ₂ , 1 OH, n CHO; n = 1, 2, 3 |
| HO(CHOCH ₂ CH ₃) _n CH ₂ CH ₃ | 2 CH ₃ , 2 CH ₂ , 1 OH, n CHO; n = 1, 2, 3 |
| HO(CHOCH ₂ CH ₃) _n (CH ₂) ₂ CH ₃ | 2 CH ₃ , 3 CH ₂ , 1 OH, n CHO; n = 1, 2, 3 |
| HO(CHO(CH ₂) ₂ CH ₃) _n CH ₃ | 2 CH ₃ , 2 CH ₂ , 1 OH, n CHO; n = 1, 2, 3 |
| HO(CHO(CH ₂) ₂ CH ₃) _n CH ₂ CH ₃ | 2 CH ₃ , 3 CH ₂ , 1 OH, n CHO; n = 1, 2, 3 |
| HO(CHO(CH ₂) ₂ CH ₃) _n (CH ₂) ₂ CH ₃ | 2 CH ₃ , 4 CH ₂ , 1 OH, n CHO; n = 1, 2, 3 |
| HO(CHO(CH ₂) ₅ CH ₃) _n CH ₃ | 2 CH ₃ , 5 CH ₂ , 1 OH, n CHO; n = 1, 2, 3 |
| HO(CHO(CH ₂) ₅ CH ₃) _n CH ₂ CH ₃ | 2 CH ₃ , 6 CH ₂ , 1 OH, n CHO; n = 1, 2, 3 |
| HO(CHO(CH ₂) ₅ CH ₃) _n (CH ₂) ₂ CH ₃ | 2 CH ₃ , 7 CH ₂ , 1 OH, n CHO; n = 1, 2, 3 |
| HO(CHO(CH ₂) ₈ CH ₃) _n CH ₃ | 2 CH ₃ , 8 CH ₂ , 1 OH, n CHO; n = 1, 2, 3 |
| HO(CHO(CH ₂) ₈ CH ₃) _n CH ₂ CH ₃ | 2 CH ₃ , 9 CH ₂ , 1 OH, n CHO; n = 1, 2, 3 |
| HOCHOC ₆ H ₄ ClCH ₃ | 1 CH ₃ , 1 OH, 1 CHO, 1 AC, 4 ACH, 1 ACCl |
| CH ₃ OCHC ₆ H ₄ ClOCH ₃ | 1 CH, 1 AC, 4 ACH, 1 ACCl, 2 CH ₃ O |
| HOCHOC ₆ H ₄ ClCH ₂ CH ₃ | 1 CH ₃ , 1 CH ₂ , 1 OH, 1 CHO, 1 AC, 4 ACH, 1 ACCl |
| CH ₃ CH ₂ OCHC ₆ H ₄ ClOCH ₂ CH ₃ | 1 CH, 2 CH ₃ , 1 AC, 4 ACH, 1 ACCl, 2 CH ₂ O |
| HOCHOC ₆ H ₄ Cl(CH ₂) ₂ CH ₃ | 1 CH ₃ , 2 CH ₂ , 1 OH, 1 CHO, 1 AC, 4 ACH, 1 ACCl |
| CH ₃ CH ₂ CH ₂ OCHC ₆ H ₄ ClOCH ₂ CH ₂ CH ₃ | 1 CH, 2 CH ₂ , 2 CH ₃ , 1 AC, 4 ACH, 1 ACCl, 2 CH ₂ O |
| HO(CHO(CH ₂) ₂ C ₆ H ₅) _n CH ₃ | 1 CH ₃ , 2 CH ₂ , 1 CHO, 1 OH, 1 AC, 5 ACH; n = 1, 2, 3 |
| HO(CHO(CH ₂) ₂ C ₆ H ₅) _n CH ₂ CH ₃ | 1 CH ₃ , 3 CH ₂ , 1 CHO, 1 OH, 1 AC, 5 ACH; n = 1, 2, 3 |
| HO(CHO(CH ₂) ₂ C ₆ H ₅) _n (CH ₂) ₂ CH ₃ | 1 CH ₃ , 4 CH ₂ , 1 CHO, 1 OH, 1 AC, 5 ACH; n = 1, 2, 3 |

Tabelle 8.459: Volumen- und Oberflächenparameter für UNIFAC

| Gruppe | Nummer | r | q |
|---------------------|--------|--------|--------|
| CHO (Aldehydgruppe) | 1 | 0,7173 | 0,7710 |
| CH ₃ OH | 2 | 0,8585 | 0,9938 |
| CHO | 3 | 1,1434 | 0,8968 |
| CH ₂ O | 4 | 1,1434 | 1,2495 |
| CH ₃ O | 5 | 1,1434 | 1,2495 |
| CH | 6 | 0,6325 | 0,3554 |
| CH ₂ | 7 | 0,6325 | 0,7081 |
| CH ₃ | 8 | 0,6325 | 1,0608 |
| OH | 9 | 1,2302 | 0,8927 |
| AC | 10 | 0,3652 | 0,1200 |
| ACH | 11 | 0,5313 | 0,4000 |
| ACCl | 12 | 1,1562 | 0,8440 |
| H ₂ O | 13 | 1,7334 | 2,4561 |

Tabelle 8.460: mod. UNIFAC (Dortmund) Wechselwirkungsparameter a_{ij} / K

| i/j | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 |
|-----|----------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|----------|---------|---------|----------|---------|
| 1 | / | -158,40 | 209,00 | 209,00 | 209,00 | 256,21 | 256,21 | 256,21 | 1590,00 | 1011,00 | 1011,00 | 985,70 | 512,60 |
| 2 | -392,50 | / | -87,48 | -87,48 | -87,48 | 82,59 | 82,59 | 82,59 | -1218,20 | 13,73 | 13,73 | 3000,00 | -328,50 |
| 3 | 235,70 | 475,20 | / | 0,0 | 0,0 | -9,65 | -9,65 | -9,65 | 650,90 | 179,00 | 179,00 | 974,00 | 140,70 |
| 4 | 235,70 | 475,20 | 0,0 | / | 0,0 | -9,65 | -9,65 | -9,65 | 650,90 | 179,00 | 179,00 | 974,00 | 140,70 |
| 5 | 235,70 | 475,20 | 0,0 | 0,0 | / | -9,65 | -9,65 | -9,65 | 650,90 | 179,00 | 179,00 | 974,00 | 140,70 |
| 6 | 875,85 | 2409,40 | 233,10 | 233,10 | 233,10 | / | 0,0 | 0,0 | 2777,00 | 114,20 | 114,20 | -1385,00 | 1391,30 |
| 7 | 875,85 | 2409,40 | 233,10 | 233,10 | 233,10 | 0,0 | / | 0,0 | 2777,00 | 114,20 | 114,20 | -1385,00 | 1391,30 |
| 8 | 875,85 | 2409,40 | 233,10 | 233,10 | 233,10 | 0,0 | 0,0 | / | 2777,00 | 114,20 | 114,20 | -1385,00 | 1391,30 |
| 9 | -281,40 | 346,31 | 816,70 | 816,70 | 816,70 | 1606,00 | 1606,00 | 1606,00 | / | 3049,00 | 3049,00 | 1862,00 | -801,90 |
| 10 | -365,50 | 1604,30 | -87,08 | -87,08 | -87,08 | 16,07 | 16,07 | 16,07 | 3972,00 | / | 0,0 | 595,20 | 792,00 |
| 11 | -365,50 | 1604,30 | -87,08 | -87,08 | -87,08 | 16,07 | 16,07 | 16,07 | 3972,00 | 0,0 | / | 595,20 | 792,00 |
| 12 | -888,30 | 2955,00 | 381,10 | 381,10 | 381,10 | 3264,00 | 3264,00 | 3264,00 | 3664,00 | 1885,00 | 1885,00 | / | 591,60 |
| 13 | -1545,00 | -524,30 | -197,50 | -197,50 | -197,50 | -17,25 | -17,25 | -17,25 | 1460,00 | 332,30 | 332,30 | -1895,00 | / |

Tabelle 8.461: mod. UNIFAC (Dortmund) Wechselwirkungsparameter b_{ij} / K

| i/j | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 |
|-----|--------|---------|---------|---------|---------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|---------|
| 1 | / | -0,6469 | -0,6241 | -0,6241 | -0,6241 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | -24,5700 | -2,1670 | -2,1670 | -2,9860 | -2,1450 |
| 2 | 2,2560 | / | -0,5522 | -0,5522 | -0,5522 | -0,4857 | -0,4857 | -0,4857 | 9,7928 | -0,1177 | -0,1177 | -11,8100 | 1,0823 |
| 3 | 0,1314 | 0,1198 | / | 0,0 | 0,0 | -0,0324 | -0,0324 | -0,0324 | -0,7132 | 0,0560 | 0,0560 | -1,3680 | 0,0568 |
| 4 | 0,1314 | 0,1198 | 0,0 | / | 0,0 | -0,0324 | -0,0324 | -0,0324 | -0,7132 | 0,0560 | 0,0560 | -1,3680 | 0,0568 |
| 5 | 0,1314 | 0,1198 | 0,0 | 0,0 | / | -0,0324 | -0,0324 | -0,0324 | -0,7132 | 0,0560 | 0,0560 | -1,3680 | 0,0568 |
| 6 | 0,0 | -3,0099 | -0,3155 | -0,3155 | -0,3155 | / | 0,0 | 0,0 | -4,6740 | 0,0933 | 0,0933 | 15,8900 | -3,6156 |
| 7 | 0,0 | -3,0099 | -0,3155 | -0,3155 | -0,3155 | 0,0 | / | 0,0 | -4,6740 | 0,0933 | 0,0933 | 15,8900 | -3,6156 |
| 8 | 0,0 | -3,0099 | -0,3155 | -0,3155 | -0,3155 | 0,0 | 0,0 | / | -4,6740 | 0,0933 | 0,0933 | 15,8900 | -3,6156 |
| 9 | 2,3790 | -2,4583 | -5,0920 | -5,0920 | -5,0920 | -4,6740 | -4,6740 | -4,6740 | / | -12,7700 | -12,7700 | 32,0700 | 3,8240 |
| 10 | 1,8740 | -2,0299 | -0,1859 | -0,1859 | -0,1859 | -0,2998 | -0,2998 | -0,2998 | -13,1600 | / | 0,0 | 3,3090 | -1,7260 |
| 11 | 1,8740 | -2,0299 | -0,1859 | -0,1859 | -0,1859 | -0,2998 | -0,2998 | -0,2998 | -13,1600 | 0,0 | / | 3,3090 | -1,7260 |
| 12 | 3,4260 | -6,3830 | -5,6820 | -5,6820 | -5,6820 | -20,8400 | -20,8400 | -20,8400 | 34,1300 | -10,9800 | -10,9800 | / | -3,0800 |
| 13 | 6,5120 | 4,6065 | 0,1766 | 0,1766 | 0,1766 | 0,8389 | 0,8389 | 0,8389 | -8,6730 | 1,1580 | 1,1580 | 9,3030 | / |

Tabelle 8.462: mod. UNIFAC (Dortmund) Wechselwirkungsparameter c_{ij} / K

| i/j | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 |
|-----|----------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|----------|---------|---------|----------|----------|
| 1 | / | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,06212 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | / |
| 2 | 0,0 | / | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | -0,01616 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | -0,0022 |
| 3 | 0,0 | 0,0 | / | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,00082 | 0,0 | 0,0 | -0,01983 | 0,0 |
| 4 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | / | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,00082 | 0,0 | 0,0 | -0,01983 | 0,0 |
| 5 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | / | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,00082 | 0,0 | 0,0 | -0,01983 | 0,0 |
| 6 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | / | 0,0 | 0,0 | 0,00155 | 0,0 | 0,0 | -0,04831 | 0,00114 |
| 7 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | / | 0,0 | 0,00155 | 0,0 | 0,0 | -0,04831 | 0,00114 |
| 8 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | / | 0,00155 | 0,0 | 0,0 | -0,04831 | 0,00114 |
| 9 | -0,00667 | 0,00293 | 0,00607 | 0,00607 | 0,00607 | 0,00092 | 0,00092 | 0,00092 | / | 0,01435 | 0,01435 | -0,00940 | -0,00751 |
| 10 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,01208 | / | 0,0 | -0,02844 | 0,0 |
| 11 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,01208 | 0,0 | / | -0,02844 | 0,0 |
| 12 | 0,0 | 0,0 | 0,01675 | 0,01675 | 0,01675 | 0,03317 | 0,03317 | 0,03317 | 0,00299 | 0,01661 | 0,01661 | / | 0,0 |
| 13 | 0 | -0,004 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,00090 | 0,00090 | 0,00090 | 0,01641 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | / |

8.1.6 Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K

8.1.6.1 Systeme mit Acetaldehyd

Tabelle 8.463: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Acetaldehyd mit Methanol, Bezugsgröße Acetaldehyd, $T = 295 \text{ K}$

| $n_A^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|-------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 40,8 | 59,2 | 12,162 | 2,604 | 31,68 | 0,017 | 0,908 | 0,015 | 0,276 | 0,918 | 0,25 |
| 49,8 | 50,2 | 10,841 | 2,126 | 23,05 | 0,017 | 0,890 | 0,015 | 0,168 | 0,896 | 0,15 |
| 60,1 | 39,9 | 6,938 | 1,473 | 10,22 | 0,022 | 0,924 | 0,020 | 0,179 | 0,933 | 0,17 |

Tabelle 8.464: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Acetaldehyd mit Methanol, Bezugsgröße Methanol, $T = 295 \text{ K}$

| $n_A^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|-------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 40,8 | 59,2 | 14,266 | 2,701 | 38,53 | 0,016 | 0,905 | 0,015 | 0,31 | 0,91 | 0,283 |
| 49,8 | 50,2 | 11,242 | 2,150 | 24,17 | 0,017 | 0,888 | 0,015 | 0,18 | 0,89 | 0,158 |
| 60,1 | 39,9 | 11,400 | 1,605 | 18,30 | 0,014 | 0,898 | 0,013 | 0,12 | 0,9 | 0,108 |

Tabelle 8.465: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Acetaldehyd mit Methanol, Bezugsgröße Acetaldehyd, $T = 273 \text{ K}$

| $n_A^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|--------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 40,8 | 59,2 | 45,66 | 14,00 | 639,19 | 0,012 | 0,946 | 0,012 | 0,243 | 0,959 | 0,233 |
| 49,8 | 50,2 | 39,68 | 7,75 | 307,48 | 0,012 | 0,984 | 0,012 | 0,090 | 0,993 | 0,089 |
| 60,1 | 39,9 | 17,84 | 1,87 | 33,29 | 0,022 | 1,227 | 0,027 | 0,064 | 1,241 | 0,080 |

Tabelle 8.466: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Acetaldehyd mit Methanol, Bezugsgröße Methanol, $T = 273 \text{ K}$

| $n_A^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|--------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 40,8 | 59,2 | 51,21 | 14,86 | 761,08 | 0,013 | 0,940 | 0,012 | 0,229 | 0,953 | 0,218 |
| 49,8 | 50,2 | 39,87 | 7,81 | 311,52 | 0,012 | 0,983 | 0,012 | 0,088 | 0,992 | 0,087 |
| 60,1 | 39,9 | 39,20 | 2,36 | 92,52 | 0,011 | 1,155 | 0,013 | 0,034 | 1,166 | 0,040 |

Tabelle 8.467: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Acetaldehyd mit Methanol, Bezugsgröße Acetaldehyd, $T = 255 \text{ K}$

| $n_A^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|---------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 49,8 | 50,2 | 111,24 | 86,09 | 9576,75 | 0,006 | 1,025 | 0,006 | 0,066 | 1,039 | 0,069 |

Tabelle 8.468: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Acetaldehyd mit Methanol, Bezugsgröße Methanol, $T = 255\text{ K}$

| $n_A^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|---------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 49,8 | 50,2 | 103,09 | 77,90 | 8030,72 | 0,007 | 1,034 | 0,007 | 0,069 | 1,049 | 0,072 |

Tabelle 8.469: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Acetaldehyd mit Ethanol, Bezugsgröße Acetaldehyd, $T = 295\text{ K}$

| $n_A^{(0)}$ | $n_E^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|-------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 21,1 | 77,3 | 6,55 | 2,89 | 18,91 | - | - | - | - | - | - |
| 40,3 | 58,5 | 4,88 | 2,20 | 10,75 | 0,047 | 0,956 | 0,045 | 0,626 | 0,951 | 0,595 |
| 50,1 | 48,9 | 3,94 | 1,75 | 6,88 | 0,046 | 0,957 | 0,044 | 0,458 | 0,953 | 0,436 |
| 60,3 | 38,9 | 3,91 | 1,40 | 5,47 | 0,042 | 0,960 | 0,040 | 0,252 | 0,958 | 0,241 |
| 80,2 | 19,4 | 2,58 | 1,05 | 2,72 | 0,051 | 0,973 | 0,050 | 0,235 | 0,980 | 0,230 |

Tabelle 8.470: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Acetaldehyd mit Ethanol, Bezugsgröße Ethanol, $T = 295\text{ K}$

| $n_A^{(0)}$ | $n_E^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|-------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 21,1 | 77,3 | 6,65 | 2,89 | 19,22 | - | - | - | - | - | - |
| 40,3 | 58,5 | 5,31 | 2,24 | 11,90 | 0,045 | 0,955 | 0,043 | 0,597 | 0,950 | 0,567 |
| 50,1 | 48,9 | 4,70 | 1,80 | 8,45 | 0,041 | 0,956 | 0,039 | 0,379 | 0,952 | 0,360 |
| 60,3 | 38,9 | 4,11 | 1,41 | 5,78 | 0,040 | 0,960 | 0,038 | 0,235 | 0,958 | 0,225 |
| 80,2 | 19,4 | 3,95 | 1,06 | 4,17 | 0,035 | 0,972 | 0,034 | 0,150 | 0,978 | 0,147 |

Tabelle 8.471: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Acetaldehyd mit Ethanol, Bezugsgröße Acetaldehyd, $T = 273\text{ K}$

| $n_A^{(0)}$ | $n_E^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|--------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 40,3 | 58,5 | 20,61 | 14,75 | 304,13 | 0,029 | 0,950 | 0,027 | 0,252 | 0,944 | 0,238 |
| 50,1 | 48,9 | 14,81 | 5,85 | 86,60 | 0,033 | 0,949 | 0,031 | 0,179 | 0,943 | 0,169 |
| 60,3 | 38,9 | 14,59 | 2,42 | 35,36 | 0,027 | 0,951 | 0,025 | 0,084 | 0,947 | 0,080 |

Tabelle 8.472: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Acetaldehyd mit Ethanol, Bezugsgröße Ethanol, $T = 273\text{ K}$

| $n_A^{(0)}$ | $n_E^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|--------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 40,3 | 58,5 | 23,51 | 16,03 | 376,78 | 0,028 | 0,949 | 0,026 | 0,293 | 0,943 | 0,276 |
| 50,1 | 48,9 | 19,33 | 6,85 | 132,49 | 0,030 | 0,948 | 0,029 | 0,156 | 0,942 | 0,147 |
| 60,3 | 38,9 | 13,95 | 2,39 | 33,33 | 0,027 | 0,952 | 0,026 | 0,085 | 0,947 | 0,080 |

Tabelle 8.473: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Acetaldehyd mit Ethanol, Bezugsgröße Acetaldehyd, $T = 255\text{ K}$

| $n_A^{(0)}$ | $n_E^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|---------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 50,1 | 48,9 | 36,39 | 36,50 | 1328,19 | 0,018 | 0,962 | 0,018 | 0,134 | 0,962 | 0,129 |

Tabelle 8.474: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Acetaldehyd mit Ethanol, Bezugsgröße Ethanol, $T = 255\text{ K}$

| $n_A^{(0)}$ | $n_E^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|---------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 50,1 | 48,9 | 75,49 | 94,98 | 7170,69 | 0,013 | 0,961 | 0,013 | 0,099 | 0,960 | 0,095 |

Tabelle 8.475: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Acetaldehyd mit 1-Propanol, Bezugsgröße Acetaldehyd, $T = 295\text{ K}$

| $n_A^{(0)}$ | $n_{1-P}^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-----------------|-----------|----------------|-------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 25,7 | 73,6 | 6,86 | 2,87 | 19,73 | - | - | - | - | - | - |
| 42,0 | 58,4 | 4,76 | 2,20 | 10,46 | 0,051 | 0,958 | 0,048 | 0,510 | 0,948 | 0,484 |
| 50,3 | 49,2 | 4,07 | 1,78 | 7,24 | 0,050 | 0,959 | 0,048 | 0,371 | 0,950 | 0,353 |
| 60,0 | 39,6 | 3,38 | 1,40 | 4,74 | 0,053 | 0,962 | 0,051 | 0,277 | 0,956 | 0,265 |
| 80,3 | 19,5 | 2,49 | 1,05 | 2,61 | 0,060 | 0,974 | 0,058 | 0,235 | 0,975 | 0,229 |

Tabelle 8.476: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Acetaldehyd mit 1-Propanol, Bezugsgröße 1-Propanol, $T = 295\text{ K}$

| $n_A^{(0)}$ | $n_{1-P}^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-----------------|-----------|----------------|-------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 25,7 | 73,6 | 4,47 | 2,72 | 12,17 | - | - | - | - | - | - |
| 42,0 | 58,4 | 5,15 | 2,23 | 11,48 | 0,050 | 0,958 | 0,048 | 0,512 | 0,948 | 0,485 |
| 50,3 | 49,2 | 4,56 | 1,82 | 8,30 | 0,047 | 0,959 | 0,045 | 0,347 | 0,950 | 0,329 |
| 60,0 | 39,6 | 3,97 | 1,43 | 5,68 | 0,048 | 0,962 | 0,046 | 0,253 | 0,955 | 0,242 |
| 80,3 | 19,5 | 3,75 | 1,05 | 3,94 | 0,041 | 0,973 | 0,040 | 0,161 | 0,974 | 0,157 |

Tabelle 8.477: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Acetaldehyd mit 1-Propanol, Bezugsgröße Acetaldehyd, $T = 273\text{ K}$

| $n_A^{(0)}$ | $n_{1-P}^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-----------------|-----------|----------------|--------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 42,0 | 58,4 | 19,25 | 13,70 | 263,57 | 0,034 | 0,955 | 0,033 | 0,223 | 0,945 | 0,210 |
| 50,3 | 49,2 | 14,33 | 5,84 | 83,75 | 0,037 | 0,955 | 0,035 | 0,148 | 0,945 | 0,140 |
| 60,0 | 39,6 | 11,87 | 2,51 | 29,82 | 0,038 | 0,957 | 0,036 | 0,108 | 0,949 | 0,102 |

Tabelle 8.478: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Acetaldehyd mit 1-Propanol, Bezugsgröße 1-Propanol, $T = 273\text{ K}$

| $n_A^{(0)}$ | $n_{1-P}^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-----------------|-----------|----------------|--------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 42 | 58,41 | 18,57 | 13,40 | 248,76 | 0,034 | 0,955 | 0,033 | 0,238 | 0,945 | 0,225 |
| 50,3 | 49,203 | 15,47 | 6,12 | 94,63 | 0,036 | 0,955 | 0,034 | 0,145 | 0,945 | 0,137 |
| 60 | 39,6 | 13,17 | 2,58 | 33,95 | 0,034 | 0,957 | 0,033 | 0,102 | 0,948 | 0,097 |

Tabelle 8.479: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Acetaldehyd mit 1-Propanol, Bezugsgröße Acetaldehyd, $T = 255\text{ K}$

| $n_A^{(0)}$ | $n_{1-P}^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-----------------|-----------|----------------|---------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 50,3 | 49,2 | 43,68 | 52,32 | 2285,44 | 0,021 | 0,968 | 0,020 | 0,114 | 0,965 | 0,110 |

Tabelle 8.480: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Acetaldehyd mit 1-Propanol, Bezugsgröße 1-Propanol, $T = 255\text{ K}$

| $n_A^{(0)}$ | $n_{1-P}^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-----------------|-----------|----------------|---------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 50,3 | 49,203 | 47,38 | 58,69 | 2781,01 | 0,021 | 0,968 | 0,020 | 0,104 | 0,965 | 0,101 |

8.1.6.2 Systeme mit Propanal

Tabelle 8.481: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Propanal mit Methanol, Bezugsgröße Propanal, $T = 295\text{ K}$

| $n_P^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} | $K_{x,VA}$ | $K_{\gamma,VA}$ | K_{VA} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|-------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|------------|-----------------|----------|
| 9,8 | 89,9 | 16,66 | 2,58 | 42,92 | - | - | - | - | - | - | 0,004 | 2,41 | 0,009 |
| 24,0 | 75,3 | 14,32 | 2,83 | 40,52 | - | - | - | - | - | - | 0,000 | 3,56 | 0,002 |
| 48,9 | 49,6 | 9,25 | 1,93 | 17,89 | 0,015 | 0,96 | 0,014 | 0,233 | 0,99 | 0,230 | - | - | - |
| 72,3 | 25,5 | 7,21 | 0,96 | 6,95 | 0,015 | 1,11 | 0,017 | 0,104 | 1,14 | 0,119 | - | - | - |
| 87,1 | 10,2 | 6,29 | 0,69 | 4,32 | 0,018 | 1,39 | 0,025 | 0,090 | 1,44 | 0,130 | - | - | - |

Tabelle 8.482: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Propanal mit Methanol, Bezugsgröße Methanol, $T = 295\text{ K}$

| $n_P^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} | $K_{x,VA}$ | $K_{\gamma,VA}$ | K_{VA} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|-------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|------------|-----------------|----------|
| 9,8 | 89,9 | 12,85 | 2,55 | 32,74 | - | - | - | - | - | - | 0,004 | 2,41 | 0,009 |
| 24,0 | 75,3 | 12,11 | 2,77 | 33,55 | - | - | - | - | - | - | 0,000 | 3,58 | 0,002 |
| 48,9 | 49,6 | 8,45 | 1,89 | 15,96 | 0,015 | 0,97 | 0,015 | 0,243 | 0,99 | 0,241 | - | - | - |
| 72,3 | 25,5 | 7,50 | 0,97 | 7,25 | 0,015 | 1,11 | 0,017 | 0,100 | 1,14 | 0,114 | - | - | - |
| 87,1 | 10,2 | 8,14 | 0,69 | 5,62 | 0,014 | 1,38 | 0,020 | 0,069 | 1,43 | 0,099 | - | - | - |

Tabelle 8.483: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Propanal mit Methanol, Bezugsgröße Propanal, $T = 273\text{ K}$

| $n_P^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|--------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 39,4 | 59,4 | 36,72 | 11,75 | 431,54 | 0,011 | 1,033 | 0,012 | 0,334 | 1,069 | 0,357 |
| 48,5 | 50,0 | 29,66 | 6,14 | 182,09 | 0,011 | 1,094 | 0,012 | 0,163 | 1,124 | 0,184 |
| 59,8 | 38,3 | 27,41 | 1,66 | 45,48 | 0,010 | 1,345 | 0,013 | 0,045 | 1,381 | 0,063 |

Tabelle 8.484: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Propanal mit Methanol, Bezugsgröße Methanol, $T = 273\text{ K}$

| $n_P^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|--------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 39,4 | 59,4 | 52,13 | 14,06 | 732,92 | 0,011 | 1,014 | 0,011 | 0,294 | 1,048 | 0,308 |
| 48,5 | 50,0 | 35,22 | 6,90 | 242,99 | 0,011 | 1,077 | 0,011 | 0,141 | 1,106 | 0,156 |
| 59,8 | 38,3 | 30,18 | 1,69 | 51,09 | 0,009 | 1,338 | 0,012 | 0,043 | 1,373 | 0,059 |

Tabelle 8.485: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Propanal mit Methanol, Bezugsgröße Propanal, $T = 255\text{ K}$

| $n_P^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|---------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 48,5 | 50,0 | 73,23 | 44,97 | 3292,89 | 0,005 | 1,186 | 0,006 | 0,089 | 1,225 | 0,109 |

Tabelle 8.486: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Propanal mit Methanol, Bezugsgröße Methanol, $T = 255\text{ K}$

| $n_P^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|---------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 48,5 | 50,0 | 88,52 | 60,27 | 5334,95 | 0,005 | 1,154 | 0,006 | 0,087 | 1,191 | 0,104 |

Tabelle 8.487: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Propanal mit Ethanol, Bezugsgröße Propanal, $T = 295\text{ K}$

| $n_P^{(0)}$ | $n_E^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|-------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 10,0 | 87,9 | 6,25 | 3,03 | 18,92 | - | - | - | - | - | - |
| 23,0 | 74,8 | 5,43 | 2,72 | 14,80 | 0,038 | 0,985 | 0,038 | - | - | - |
| 47,3 | 50,2 | 3,59 | 1,76 | 6,33 | 0,040 | 0,981 | 0,039 | 0,554 | 0,990 | 0,549 |
| 75,6 | 21,7 | 3,00 | 1,06 | 3,17 | 0,041 | 0,993 | 0,041 | 0,216 | 1,009 | 0,218 |
| 86,3 | 10,8 | 3,33 | 0,98 | 3,28 | 0,035 | 1,001 | 0,035 | 0,192 | 1,022 | 0,196 |

Tabelle 8.488: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Propanal mit Ethanol, Bezugsgröße Ethanol, $T = 295\text{ K}$

| $n_P^{(0)}$ | $n_E^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|-------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 10,0 | 87,9 | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 23,0 | 74,8 | 8,08 | 2,83 | 22,89 | 0,04 | 0,984 | 0,035 | - | - | - |
| 47,3 | 50,2 | 4,35 | 1,82 | 7,92 | 0,04 | 0,979 | 0,036 | 0,456 | 0,988 | 0,450 |
| 75,6 | 21,7 | 3,39 | 1,06 | 3,60 | 0,04 | 0,992 | 0,035 | 0,207 | 1,008 | 0,209 |
| 86,3 | 10,8 | 3,62 | 0,98 | 3,56 | 0,03 | 1,000 | 0,032 | 0,171 | 1,021 | 0,175 |

Tabelle 8.489: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Propanal mit Ethanol, Bezugsgröße Propanal, $T = 273\text{ K}$

| $n_P^{(0)}$ | $n_E^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|--------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 38,8 | 58,8 | 13,74 | 12,13 | 166,72 | 0,029 | 0,986 | 0,029 | 0,462 | 0,998 | 0,461 |
| 49,5 | 48,0 | 13,25 | 4,96 | 65,78 | 0,024 | 0,983 | 0,023 | 0,172 | 0,994 | 0,171 |
| 58,2 | 39,2 | 12,19 | 2,35 | 28,64 | 0,021 | 0,985 | 0,021 | 0,118 | 0,997 | 0,118 |

Tabelle 8.490: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Propanal mit Ethanol, Bezugsgröße Ethanol, $T = 273\text{ K}$

| $n_P^{(0)}$ | $n_E^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|--------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 38,8 | 58,8 | 36,05 | 20,88 | 752,82 | 0,02 | 0,983 | 0,024 | 0,386 | 0,995 | 0,384 |
| 49,5 | 49,0 | 14,32 | 5,42 | 77,61 | 0,02 | 0,982 | 0,023 | 0,163 | 0,993 | 0,162 |
| 58,2 | 40,0 | 11,36 | 2,40 | 27,25 | 0,02 | 0,985 | 0,023 | 0,127 | 0,997 | 0,127 |

Tabelle 8.491: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Propanal mit Ethanol, Bezugsgröße Propanal, $T = 255\text{ K}$

| $n_P^{(0)}$ | $n_E^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|--------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 49,5 | 49,0 | 27,49 | 22,91 | 629,86 | 0,014 | 0,995 | 0,014 | 0,160 | 1,012 | 0,162 |

Tabelle 8.492: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Propanal mit Ethanol, Bezugsgröße Ethanol, $T = 255\text{ K}$

| $n_P^{(0)}$ | $n_E^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|--------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 49,5 | 49,0 | 33,90 | 27,34 | 926,80 | 0,01 | 0,994 | 0,012 | 0,118 | 1,011 | 0,119 |

Tabelle 8.493: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Propanal mit 1-Propanol, Bezugsgröße Propanal, $T = 295\text{ K}$

| $n_P^{(0)}$ | $n_{1-P}^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-----------------|-----------|----------------|-------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 9,7 | 89,1 | 7,24 | 3,23 | 23,35 | - | - | - | - | - | - |
| 23,9 | 74,6 | 5,09 | 2,82 | 14,34 | 0,044 | 0,970 | 0,042 | - | - | - |
| 49,1 | 48,9 | 4,15 | 1,80 | 7,45 | 0,030 | 0,969 | 0,029 | 0,425 | 0,968 | 0,412 |
| 72,5 | 25,0 | 4,01 | 1,13 | 4,52 | 0,029 | 0,978 | 0,028 | 0,193 | 0,984 | 0,189 |
| 86,6 | 10,6 | 3,60 | 1,01 | 3,62 | 0,031 | 0,989 | 0,031 | 0,170 | 1,002 | 0,170 |

Tabelle 8.494: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Propanal mit 1-Propanol, Bezugsgröße 1-Propanol, $T = 295\text{ K}$

| $n_P^{(0)}$ | $n_{1-P}^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-----------------|-----------|----------------|-------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 9,7 | 89,1 | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 23,9 | 74,6 | 13,02 | 3,07 | 40,02 | 0,04 | 0,969 | 0,035 | - | - | - |
| 49,1 | 48,9 | 3,45 | 1,74 | 6,01 | 0,03 | 0,970 | 0,034 | 0,483 | 0,970 | 0,469 |
| 72,5 | 25,0 | 3,21 | 1,12 | 3,60 | 0,03 | 0,979 | 0,034 | 0,259 | 0,985 | 0,255 |
| 86,6 | 10,6 | 3,54 | 1,01 | 3,56 | 0,03 | 0,989 | 0,030 | 0,182 | 1,002 | 0,183 |

Tabelle 8.495: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Propanal mit 1-Propanol, Bezugsgröße Propanal, $T = 273\text{ K}$

| $n_P^{(0)}$ | $n_{1-P}^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-----------------|-----------|----------------|--------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 38,6 | 59,6 | 15,95 | 13,93 | 222,25 | 0,025 | 0,974 | 0,024 | 0,306 | 0,977 | 0,299 |
| 48,1 | 49,9 | 14,26 | 6,38 | 90,96 | 0,028 | 0,973 | 0,028 | 0,193 | 0,975 | 0,188 |
| 58,3 | 39,5 | 4,34 | 3,45 | 14,97 | 0,097 | 0,977 | 0,095 | 0,353 | 0,982 | 0,347 |

Tabelle 8.496: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Propanal mit 1-Propanol, Bezugsgröße 1-Propanol, $T = 273\text{ K}$

| $n_P^{(0)}$ | $n_{1-P}^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-----------------|-----------|----------------|--------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 38,6 | 59,6 | 16,24 | 14,06 | 228,37 | 0,02 | 0,974 | 0,024 | 0,295 | 0,977 | 0,289 |
| 48,1 | 49,9 | 13,51 | 6,18 | 83,47 | 0,03 | 0,973 | 0,029 | 0,192 | 0,975 | 0,188 |
| 58,3 | 39,5 | 10,19 | 2,40 | 24,44 | 0,03 | 0,975 | 0,031 | 0,111 | 0,980 | 0,109 |

8.1.6.3 Systeme mit Butanal

Tabelle 8.497: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Butanal mit Methanol, Bezugsgröße Butanal, $T = 295 \text{ K}$

| $n_B^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|-------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 39,699 | 59,9 | 7,38 | 2,13 | 15,73 | 0,018 | 1,050 | 0,019 | 0,726 | 1,105 | 0,802 |
| 49,599 | 49,9 | 7,04 | 1,71 | 12,07 | 0,017 | 1,034 | 0,017 | 0,257 | 1,085 | 0,279 |
| 59,4 | 40 | 6,58 | 1,29 | 8,47 | 0,014 | 1,063 | 0,015 | 0,171 | 1,107 | 0,189 |

Tabelle 8.498: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Butanal mit Methanol, Bezugsgröße Methanol, $T = 295 \text{ K}$

| $n_B^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|-------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 39,699 | 59,9 | 10,71 | 2,33 | 24,94 | 0,016 | 1,040 | 0,017 | 0,696 | 1,092 | 0,760 |
| 49,599 | 49,9 | 7,18 | 1,72 | 12,37 | 0,016 | 1,033 | 0,017 | 0,251 | 1,084 | 0,272 |
| 59,4 | 40 | 6,25 | 1,28 | 7,96 | 0,015 | 1,066 | 0,016 | 0,175 | 1,111 | 0,195 |

Tabelle 8.499: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Butanal mit Methanol, Bezugsgröße Butanal, $T = 273 \text{ K}$

| $n_B^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|--------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 39,699 | 59,9 | 35,15 | 10,78 | 378,75 | 0,009 | 1,110 | 0,010 | 0,305 | 1,169 | 0,356 |
| 49,599 | 49,9 | 28,57 | 5,11 | 145,88 | 0,010 | 1,192 | 0,012 | 0,108 | 1,244 | 0,134 |
| 59,4 | 40 | 26,71 | 1,66 | 44,41 | 0,008 | 1,427 | 0,012 | 0,051 | 1,487 | 0,077 |

Tabelle 8.500: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Butanal mit Methanol, Bezugsgröße Methanol, $T = 273 \text{ K}$

| $n_B^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|--------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 39,699 | 59,9 | 31,22 | 10,05 | 313,60 | 0,010 | 1,119 | 0,011 | 0,324 | 1,178 | 0,382 |
| 49,599 | 49,9 | 27,12 | 4,89 | 132,76 | 0,010 | 1,200 | 0,012 | 0,114 | 1,252 | 0,142 |
| 59,4 | 40 | 24,16 | 1,62 | 39,20 | 0,009 | 1,436 | 0,013 | 0,054 | 1,497 | 0,082 |

Tabelle 8.501: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Butanal mit Methanol, Bezugsgröße Butanal, $T = 255 \text{ K}$

| $n_B^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|---------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 49,599 | 49,9 | 87,63 | 47,13 | 4129,87 | 0,005 | 1,268 | 0,007 | 0,072 | 1,329 | 0,096 |

Tabelle 8.502: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Butanal mit Methanol, Bezugsgröße Methanol, $T = 255 \text{ K}$

| $n_B^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|---------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 49,599 | 49,9 | 74,54 | 35,15 | 2619,78 | 0,005 | 1,305 | 0,007 | 0,071 | 1,368 | 0,097 |

Tabelle 8.503: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Butanal mit Ethanol, Bezugsgröße Butanal, $T = 295\text{ K}$

| $n_B^{(0)}$ | $n_E^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|-------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 19,8 | 78,4 | 4,49 | 2,66 | 11,95 | - | - | - | - | - | - |
| 39,2 | 59,2 | 3,82 | 2,00 | 7,64 | 0,029 | 1,024 | 0,029 | - | - | - |
| 49,3 | 49,2 | 3,00 | 1,60 | 4,79 | 0,037 | 1,035 | 0,038 | 0,546 | 1,067 | 0,582 |
| 58,2 | 39,4 | 2,60 | 1,31 | 3,40 | 0,039 | 1,025 | 0,040 | 0,366 | 1,053 | 0,385 |
| 79,6 | 19,2 | 2,81 | 0,98 | 2,75 | 0,031 | 1,033 | 0,032 | 0,233 | 1,066 | 0,248 |

Tabelle 8.504: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Butanal mit Ethanol, Bezugsgröße Ethanol, $T = 295\text{ K}$

| $n_B^{(0)}$ | $n_E^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|-------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 19,8 | 78,4 | 4,67 | 2,67 | 12,46 | - | - | - | - | - | - |
| 39,2 | 59,2 | 2,97 | 1,91 | 5,68 | 0,033 | 1,026 | 0,034 | - | - | - |
| 49,3 | 49,2 | 3,04 | 1,60 | 4,86 | 0,035 | 1,035 | 0,036 | 0,541 | 1,067 | 0,577 |
| 58,2 | 39,4 | 2,97 | 1,32 | 3,93 | 0,035 | 1,024 | 0,036 | 0,296 | 1,051 | 0,311 |
| 79,6 | 19,2 | 2,80 | 0,98 | 2,74 | 0,027 | 1,033 | 0,028 | 0,242 | 1,066 | 0,258 |

Tabelle 8.505: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Butanal mit Ethanol, Bezugsgröße Butanal, $T = 273\text{ K}$

| $n_B^{(0)}$ | $n_E^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|--------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 39,2 | 59,2 | 12,23 | 10,38 | 126,89 | 0,026 | 1,028 | 0,026 | 0,191 | 1,059 | 0,202 |
| 49,3 | 49,2 | 12,04 | 4,73 | 57,00 | 0,021 | 1,023 | 0,022 | 0,196 | 1,051 | 0,206 |
| 58,2 | 39,4 | 11,22 | 2,22 | 24,90 | 0,021 | 1,024 | 0,022 | 0,111 | 1,052 | 0,117 |

Tabelle 8.506: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Butanal mit Ethanol, Bezugsgröße Ethanol, $T = 273\text{ K}$

| $n_B^{(0)}$ | $n_E^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|--------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 39,2 | 59,2 | 16,04 | 12,48 | 200,12 | 0,023 | 1,027 | 0,024 | 0,268 | 1,057 | 0,283 |
| 49,3 | 49,2 | 10,60 | 4,48 | 47,44 | 0,025 | 1,024 | 0,026 | 0,202 | 1,052 | 0,213 |
| 58,2 | 39,4 | 10,76 | 2,20 | 23,69 | 0,023 | 1,024 | 0,023 | 0,111 | 1,052 | 0,117 |

Tabelle 8.507: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Butanal mit Ethanol, Bezugsgröße Butanal, $T = 255\text{ K}$

| $n_B^{(0)}$ | $n_E^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|---------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 49,3 | 49,2 | 37,21 | 31,37 | 1167,23 | 0,011 | 1,033 | 0,011 | 0,130 | 1,065 | 0,138 |

Tabelle 8.508: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Butanal mit Ethanol, Bezugsgröße Ethanol, $T = 255\text{ K}$

| $n_B^{(0)}$ | $n_E^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|--------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 49,3 | 49,2 | 30,19 | 22,33 | 674,10 | 0,009 | 1,034 | 0,010 | 0,146 | 1,067 | 0,156 |

Tabelle 8.509: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Butanal mit 1-Propanol, Bezugsgröße Butanal, $T = 295\text{ K}$

| $n_B^{(0)}$ | $n_{1-P}^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-----------------|-----------|----------------|-------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 20,0 | 80,0 | 4,31 | 2,82 | 12,15 | - | - | - | - | - | - |
| 40,0 | 60,0 | 3,07 | 2,02 | 6,22 | 0,042 | 0,998 | 0,042 | - | - | - |
| 50,0 | 50,0 | 3,22 | 1,69 | 5,45 | 0,036 | 0,997 | 0,036 | 0,363 | 1,011 | 0,367 |
| 60,1 | 39,9 | 2,88 | 1,36 | 3,92 | 0,033 | 1,000 | 0,033 | 0,303 | 1,015 | 0,308 |
| 80,0 | 20,0 | 2,47 | 1,02 | 2,51 | 0,035 | 1,009 | 0,036 | 0,264 | 1,031 | 0,272 |

Tabelle 8.510: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Butanal mit 1-Propanol, Bezugsgröße 1-Propanol, $T = 295\text{ K}$

| $n_B^{(0)}$ | $n_{1-P}^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-----------------|-----------|----------------|-------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 20,0 | 80,0 | 13,96 | 3,08 | 43,06 | - | - | - | - | - | - |
| 40,0 | 60,0 | 4,29 | 2,15 | 9,19 | 0,036 | 0,996 | 0,036 | - | - | - |
| 50,0 | 50,0 | 3,04 | 1,67 | 5,08 | 0,038 | 0,998 | 0,038 | 0,360 | 1,012 | 0,364 |
| 60,1 | 39,9 | 2,84 | 1,36 | 3,86 | 0,033 | 1,000 | 0,033 | 0,316 | 1,015 | 0,321 |
| 80,0 | 20,0 | 2,81 | 1,02 | 2,86 | 0,031 | 1,009 | 0,032 | 0,232 | 1,030 | 0,239 |

Tabelle 8.511: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Butanal mit 1-Propanol, Bezugsgröße Butanal, $T = 273\text{ K}$

| $n_B^{(0)}$ | $n_{1-P}^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-----------------|-----------|----------------|--------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 40,0 | 60,0 | 14,92 | 11,98 | 178,71 | 0,020 | 1,001 | 0,020 | 0,000 | - | - |
| 50,0 | 50,0 | 12,94 | 5,21 | 67,43 | 0,023 | 0,999 | 0,023 | 0,160 | 1,014 | 0,162 |
| 60,1 | 39,9 | 11,69 | 2,25 | 26,27 | 0,021 | 1,001 | 0,021 | 0,086 | 1,018 | 0,087 |

Tabelle 8.512: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Butanal mit 1-Propanol, Bezugsgröße 1-Propanol, $T = 273\text{ K}$

| $n_B^{(0)}$ | $n_{1-P}^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-----------------|-----------|----------------|-------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 40,0 | 60,0 | 10,15 | 9,30 | 94,34 | 0,024 | 1,003 | 0,024 | - | - | - |
| 50,0 | 50,0 | 10,90 | 4,75 | 51,79 | 0,025 | 1,000 | 0,025 | 0,179 | 1,016 | 0,182 |
| 60,1 | 39,9 | 9,46 | 2,16 | 20,43 | 0,026 | 1,002 | 0,026 | 0,102 | 1,019 | 0,104 |

Tabelle 8.513: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Butanal mit 1-Propanol, Bezugsgröße Butanal, $T = 255\text{ K}$

| $n_B^{(0)}$ | $n_{1-P}^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-----------------|-----------|----------------|---------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 50,0 | 50,0 | 40,86 | 36,40 | 1487,43 | 0,011 | 1,009 | 0,011 | 0,096 | 1,029 | 0,099 |

Tabelle 8.514: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Butanal mit 1-Propanol, Bezugsgröße 1-Propanol, $T = 295\text{ K}$

| $n_B^{(0)}$ | $n_{1-P}^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-----------------|-----------|----------------|--------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 50,0 | 50,0 | 26,85 | 20,30 | 544,92 | 0,012 | 1,011 | 0,012 | 0,090 | 1,032 | 0,093 |

8.1.6.4 Systeme mit Heptanal

Tabelle 8.515: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Heptanal mit Methanol, Bezugsgröße Heptanal, $T = 295\text{ K}$

| $n_H^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|-------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 9,7 | 90,0 | 11,93 | 2,99 | 35,71 | - | - | - | - | - | - |
| 24,0 | 75,3 | 11,21 | 2,80 | 31,34 | - | - | - | - | - | - |
| 48,6 | 49,9 | 7,06 | 1,85 | 13,06 | 0,015 | 1,016 | 0,015 | 0,288 | 1,039 | 0,299 |
| 71,0 | 26,8 | 8,01 | 1,11 | 8,87 | 0,010 | 1,024 | 0,010 | 0,110 | 1,051 | 0,116 |
| 87,7 | 9,6 | 8,22 | 0,91 | 7,50 | 0,009 | 1,038 | 0,009 | - | - | - |

Tabelle 8.516: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Heptanal mit Methanol, Bezugsgröße Methanol, $T = 295\text{ K}$

| $n_H^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|-------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 9,7 | 90,0 | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 24,0 | 75,3 | 11,74 | 2,81 | 32,93 | - | - | - | - | - | - |
| 48,6 | 49,9 | 7,51 | 1,87 | 14,01 | 0,014 | 1,016 | 0,014 | 0,276 | 1,038 | 0,287 |
| 71,0 | 26,8 | 7,17 | 1,10 | 7,86 | 0,010 | 1,024 | 0,010 | 0,137 | 1,052 | 0,144 |
| 87,7 | 9,6 | 7,44 | 0,91 | 6,78 | 0,010 | 1,038 | 0,010 | - | - | - |

8.1.6.5 Systeme mit Decanal

Tabelle 8.517: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Decanal mit Methanol, Bezugsgröße Decanal, $T = 295 \text{ K}$

| $n_D^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|-------|------------|-----------------|----------|
| 19,6 | 80,0 | 9,31 | 2,07 | 19,29 | - | - | - |
| 39,1 | 60,1 | 8,25 | 1,67 | 13,76 | - | - | - |
| 49,1 | 49,9 | 8,59 | 1,34 | 11,54 | 0,009 | 1,342 | 0,012 |
| 58,8 | 40,0 | 6,84 | 0,98 | 6,68 | 0,011 | 1,368 | 0,015 |
| 78,6 | 19,8 | 7,60 | 0,58 | 4,43 | 0,012 | 1,573 | 0,019 |

Tabelle 8.518: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von Decanal mit Methanol, Bezugsgröße Methanol, $T = 295 \text{ K}$

| $n_D^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} |
|-------------|-------------|-----------|----------------|-------|------------|-----------------|----------|
| 19,6 | 80,0 | - | - | - | - | - | - |
| 39,1 | 60,1 | 10,76 | 1,77 | 19,02 | - | - | - |
| 49,1 | 49,9 | 6,37 | 1,26 | 8,00 | 0,011 | 1,356 | 0,015 |
| 58,8 | 40,0 | 7,26 | 0,99 | 7,17 | 0,012 | 1,364 | 0,016 |
| 78,6 | 19,8 | 9,22 | 0,59 | 5,43 | 0,010 | 1,565 | 0,016 |

8.1.6.6 Systeme mit 2-Chlorbenzaldehyd

Tabelle 8.519: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von 2-Chlorbenzaldehyd mit Methanol, Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd, $T = 295 \text{ K}$

| $n_{2-C}^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,HA}$ | $K_{\gamma,HA}$ | K_{HA} | $K_{x,VA}$ | $K_{\gamma,VA}$ | K_{VA} |
|-----------------|-------------|------------|-----------------|----------|------------|-----------------|----------|
| 23,9 | 75,6 | 0,567 | 1,228 | 0,696 | 1,41 | 5,14 | 7,25 |
| 39,1 | 60,1 | 0,454 | 0,799 | 0,363 | 2,78 | 7,56 | 20,99 |
| 48,8 | 50,2 | 0,425 | 0,679 | 0,288 | 2,47 | 10,62 | 26,24 |
| 58,9 | 40,0 | 0,460 | 0,615 | 0,283 | 0,24 | 16,09 | 3,82 |
| 72,2 | 26,3 | 0,443 | 0,540 | 0,239 | 0,60 | 21,81 | 13,10 |

Tabelle 8.520: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von 2-Chlorbenzaldehyd mit Methanol, Bezugsgröße Methanol, $T = 295 \text{ K}$

| $n_{2-C}^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,HA}$ | $K_{\gamma,HA}$ | K_{HA} | $K_{x,VA}$ | $K_{\gamma,VA}$ | K_{VA} |
|-----------------|-------------|------------|-----------------|----------|------------|-----------------|----------|
| 23,9 | 75,6 | 0,720 | 1,259 | 0,907 | 1,60 | 4,94 | 7,92 |
| 39,1 | 60,1 | 0,589 | 0,799 | 0,471 | 3,45 | 7,06 | 24,38 |
| 48,8 | 50,2 | 0,597 | 0,680 | 0,406 | 3,40 | 9,90 | 33,70 |
| 58,9 | 40,0 | 0,503 | 0,621 | 0,312 | 0,26 | 15,94 | 4,12 |
| 72,2 | 26,3 | 0,579 | 0,547 | 0,317 | 0,82 | 21,43 | 17,59 |

Tabelle 8.521: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von 2-Chlorbenzaldehyd mit Methanol, Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd, $T = 273 \text{ K}$

| $n_{2-C}^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,HA}$ | $K_{\gamma,HA}$ | K_{HA} | $K_{x,VA}$ | $K_{\gamma,VA}$ | K_{VA} |
|-----------------|-------------|------------|-----------------|----------|------------|-----------------|----------|
| 38,9 | 59,9 | 0,986 | 0,597 | 0,588 | 1,75 | 13,39 | 23,42 |
| 49,1 | 49,4 | 0,851 | 0,417 | 0,355 | 2,36 | 22,36 | 52,70 |
| 58,8 | 40,0 | 0,953 | 0,361 | 0,344 | 0,78 | 35,50 | 27,78 |

Tabelle 8.522: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von 2-Chlorbenzaldehyd mit Methanol, Bezugsgröße Methanol, $T = 273 \text{ K}$

| $n_{2-C}^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,HA}$ | $K_{\gamma,HA}$ | K_{HA} | $K_{x,VA}$ | $K_{\gamma,VA}$ | K_{VA} |
|-----------------|-------------|------------|-----------------|----------|------------|-----------------|----------|
| 38,9 | 59,9 | 1,868 | 0,641 | 1,197 | 2,87 | 10,72 | 30,78 |
| 49,1 | 49,4 | 1,563 | 0,428 | 0,669 | 4,09 | 19,48 | 79,67 |
| 58,8 | 40,0 | 1,209 | 0,369 | 0,446 | 0,98 | 34,21 | 33,55 |

Tabelle 8.523: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von 2-Chlorbenzaldehyd mit Methanol, Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd, $T = 255 \text{ K}$

| $n_{2-C}^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,HA}$ | $K_{\gamma,HA}$ | K_{HA} | $K_{x,VA}$ | $K_{\gamma,VA}$ | K_{VA} |
|-----------------|-------------|------------|-----------------|----------|------------|-----------------|----------|
| 49,1 | 49,4 | 1,264 | 0,248 | 0,314 | 6,70 | 40,99 | 274,83 |

Tabelle 8.524: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von 2-Chlorbenzaldehyd mit Methanol, Bezugsgröße Methanol, $T = 255 \text{ K}$

| $n_{2-C}^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,HA}$ | $K_{\gamma,HA}$ | K_{HA} | $K_{x,VA}$ | $K_{\gamma,VA}$ | K_{VA} |
|-----------------|-------------|------------|-----------------|----------|------------|-----------------|----------|
| 49,1 | 49,4 | 3,475 | 0,249 | 0,865 | 17,32 | 34,73 | 601,59 |

Tabelle 8.525: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von 2-Chlorbenzaldehyd mit Ethanol, Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd, $T = 295 \text{ K}$

| $n_{2-C}^{(0)}$ | $n_E^{(0)}$ | $K_{x,HA}$ | $K_{\gamma,HA}$ | K_{HA} | $K_{x,VA}$ | $K_{\gamma,VA}$ | K_{VA} |
|-----------------|-------------|------------|-----------------|----------|------------|-----------------|----------|
| 10,2 | 87,7 | 0,393 | 1,792 | 0,704 | 0,50 | 6,87 | 3,46 |
| 23,8 | 74,0 | 0,285 | 1,223 | 0,348 | 0,69 | 8,79 | 6,09 |
| 49,8 | 47,7 | 0,234 | 0,721 | 0,169 | 0,72 | 17,99 | 12,96 |
| 71,1 | 26,2 | 0,229 | 0,546 | 0,125 | 1,22 | 31,64 | 38,73 |
| 87,3 | 9,8 | 0,179 | 0,469 | 0,084 | 1,87 | 46,21 | 86,45 |

Tabelle 8.526: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von 2-Chlorbenzaldehyd mit Ethanol, Bezugsgröße Ethanol, $T = 295 \text{ K}$

| $n_{2-C}^{(0)}$ | $n_E^{(0)}$ | $K_{x,HA}$ | $K_{\gamma,HA}$ | K_{HA} | $K_{x,VA}$ | $K_{\gamma,VA}$ | K_{VA} |
|-----------------|-------------|------------|-----------------|----------|------------|-----------------|----------|
| 10,2 | 87,7 | 0,519 | 1,800 | 0,934 | 0,55 | 6,74 | 3,72 |
| 23,8 | 74,0 | 0,344 | 1,223 | 0,421 | 0,79 | 8,51 | 6,74 |
| 49,8 | 47,7 | 0,266 | 0,718 | 0,191 | 0,80 | 17,74 | 14,16 |
| 71,1 | 26,2 | 0,230 | 0,542 | 0,125 | 1,80 | 31,59 | 56,70 |
| 87,3 | 9,8 | 0,291 | 0,468 | 0,136 | 2,86 | 46,13 | 131,71 |

Tabelle 8.527: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von 2-Chlorbenzaldehyd mit Ethanol, Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd, $T = 273 \text{ K}$

| $n_{2-C}^{(0)}$ | $n_E^{(0)}$ | $K_{x,HA}$ | $K_{\gamma,HA}$ | K_{HA} | $K_{x,VA}$ | $K_{\gamma,VA}$ | K_{VA} |
|-----------------|-------------|------------|-----------------|----------|------------|-----------------|----------|
| 39,0 | 58,6 | 0,533 | 1,124 | 0,600 | 1,18 | 31,63 | 37,33 |
| 48,5 | 49,0 | 0,517 | 0,803 | 0,416 | 1,17 | 54,70 | 64,23 |
| 58,3 | 39,1 | 0,493 | 0,637 | 0,314 | 1,42 | 90,75 | 129,07 |

Tabelle 8.528: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von 2-Chlorbenzaldehyd mit Ethanol, Bezugsgröße Ethanol, $T = 273 \text{ K}$

| $n_{2-C}^{(0)}$ | $n_E^{(0)}$ | $K_{x,HA}$ | $K_{\gamma,HA}$ | K_{HA} | $K_{x,VA}$ | $K_{\gamma,VA}$ | K_{VA} |
|-----------------|-------------|------------|-----------------|----------|------------|-----------------|----------|
| 39,0 | 58,6 | 0,580 | 1,119 | 0,649 | 1,29 | 30,97 | 40,09 |
| 48,5 | 49,0 | 0,576 | 0,799 | 0,460 | 1,29 | 53,87 | 69,58 |
| 58,3 | 39,1 | 0,636 | 0,630 | 0,401 | 1,75 | 89,26 | 156,35 |

Tabelle 8.529: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von 2-Chlorbenzaldehyd mit Ethanol, Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd, $T = 255 \text{ K}$

| $n_{2-C}^{(0)}$ | $n_E^{(0)}$ | $K_{x,HA}$ | $K_{\gamma,HA}$ | K_{HA} | $K_{x,VA}$ | $K_{\gamma,VA}$ | K_{VA} |
|-----------------|-------------|------------|-----------------|----------|------------|-----------------|----------|
| 48,5 | 49,0 | 1,011 | 0,854 | 0,864 | 1,15 | 152,38 | 174,82 |

Tabelle 8.530: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von 2-Chlorbenzaldehyd mit Ethanol, Bezugsgröße Ethanol, $T = 255 \text{ K}$

| $n_{2-C}^{(0)}$ | $n_E^{(0)}$ | $K_{x,HA}$ | $K_{\gamma,HA}$ | K_{HA} | $K_{x,VA}$ | $K_{\gamma,VA}$ | K_{VA} |
|-----------------|-------------|------------|-----------------|----------|------------|-----------------|----------|
| 48,5 | 49,0 | 1,250 | 0,846 | 1,057 | 1,40 | 148,01 | 207,53 |

Tabelle 8.531: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von 2-Chlorbenzaldehyd mit 1-Propanol, Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd, $T = 295\text{ K}$

| $n_{2-C}^{(0)}$ | $n_{1-P}^{(0)}$ | $K_{x,HA}$ | $K_{\gamma,HA}$ | K_{HA} | $K_{x,VA}$ | $K_{\gamma,VA}$ | K_{VA} |
|-----------------|-----------------|------------|-----------------|----------|------------|-----------------|----------|
| 8,3 | 89,5 | 0,370 | 1,886 | 0,698 | 0,02 | 9,44 | 0,23 |
| 25,1 | 73,4 | 0,270 | 1,202 | 0,325 | 0,25 | 12,21 | 3,05 |
| 48,6 | 49,4 | 0,230 | 0,741 | 0,170 | 0,46 | 21,72 | 10,09 |
| 72,1 | 25,4 | 0,218 | 0,544 | 0,118 | 0,77 | 39,80 | 30,62 |
| 86,7 | 10,5 | 0,225 | 0,475 | 0,107 | 0,27 | 55,84 | 15,21 |

Tabelle 8.532: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von 2-Chlorbenzaldehyd mit 1-Propanol, Bezugsgröße 1-Propanol, $T = 295\text{ K}$

| $n_{2-C}^{(0)}$ | $n_{1-P}^{(0)}$ | $K_{x,HA}$ | $K_{\gamma,HA}$ | K_{HA} | $K_{x,VA}$ | $K_{\gamma,VA}$ | K_{VA} |
|-----------------|-----------------|------------|-----------------|----------|------------|-----------------|----------|
| 8,3 | 89,5 | 0,380 | 1,887 | 0,718 | 0,02 | 9,42 | 0,23 |
| 25,1 | 73,4 | 0,302 | 1,203 | 0,363 | 0,29 | 11,98 | 3,42 |
| 48,6 | 49,4 | 0,256 | 0,739 | 0,189 | 0,51 | 21,46 | 10,84 |
| 72,1 | 25,4 | 0,274 | 0,542 | 0,148 | 0,98 | 39,47 | 38,58 |
| 86,7 | 10,5 | 0,269 | 0,475 | 0,128 | 0,32 | 55,74 | 17,65 |

Tabelle 8.533: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von 2-Chlorbenzaldehyd mit 1-Propanol, Bezugsgröße 2-Chlorbenzaldehyd, $T = 273\text{ K}$

| $n_{2-C}^{(0)}$ | $n_{1-P}^{(0)}$ | $K_{x,HA}$ | $K_{\gamma,HA}$ | K_{HA} | $K_{x,VA}$ | $K_{\gamma,VA}$ | K_{VA} |
|-----------------|-----------------|------------|-----------------|----------|------------|-----------------|----------|
| 38,9 | 59,3 | 0,541 | 1,103 | 0,597 | 1,60 | 38,41 | 61,40 |
| 48,4 | 49,6 | 0,482 | 0,785 | 0,378 | 1,64 | 67,54 | 110,75 |
| 58,4 | 39,4 | 0,527 | 0,619 | 0,326 | 2,30 | 112,39 | 259,03 |

Tabelle 8.534: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von 2-Chlorbenzaldehyd mit 1-Propanol, Bezugsgröße 1-Propanol, $T = 273\text{ K}$

| $n_{2-C}^{(0)}$ | $n_{1-P}^{(0)}$ | $K_{x,HA}$ | $K_{\gamma,HA}$ | K_{HA} | $K_{x,VA}$ | $K_{\gamma,VA}$ | K_{VA} |
|-----------------|-----------------|------------|-----------------|----------|------------|-----------------|----------|
| 38,9 | 59,3 | 0,570 | 1,099 | 0,627 | 1,70 | 37,91 | 64,31 |
| 48,4 | 49,6 | 0,499 | 0,783 | 0,391 | 1,69 | 67,23 | 113,33 |
| 58,4 | 39,4 | 0,589 | 0,611 | 0,360 | 2,85 | 111,98 | 319,39 |

8.1.6.7 Systeme mit 3-Phenylpropanal

Tabelle 8.535: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von 3-Phenylpropanal mit Methanol, Bezugsgröße 3-Phenylpropanal, $T = 295\text{ K}$

| $n_{3-P}^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-----------------|-------------|-----------|----------------|-------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 23,0 | 76,3 | 17,18 | 2,05 | 35,29 | - | - | - | - | - | - |
| 38,9 | 59,9 | 17,11 | 1,89 | 32,36 | - | - | - | - | - | - |
| 48,4 | 50,1 | 11,37 | 1,46 | 16,65 | 0,008 | 1,158 | 0,009 | - | - | - |
| 74,7 | 23,0 | 35,27 | 0,79 | 27,72 | 0,002 | 1,121 | 0,003 | 0,027 | 1,210 | 0,032 |

Tabelle 8.536: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von 3-Phenylpropanal mit Methanol, Bezugsgröße Methanol, $T = 295\text{ K}$

| $n_{3-P}^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I | $K_{x,II}$ | $K_{\gamma,II}$ | K_{II} | $K_{x,III}$ | $K_{\gamma,III}$ | K_{III} |
|-----------------|-------------|-----------|----------------|-------|------------|-----------------|----------|-------------|------------------|-----------|
| 23,0 | 76,3 | 14,93 | 2,03 | 30,26 | - | - | - | - | - | - |
| 38,9 | 59,9 | 4,16 | 1,39 | 5,79 | - | - | - | - | - | - |
| 48,4 | 50,1 | 8,68 | 1,39 | 12,06 | 0,009 | 1,162 | 0,011 | - | - | - |
| 74,7 | 23,0 | 8,15 | 0,76 | 6,16 | 0,010 | 1,138 | 0,011 | 0,107 | 1,231 | 0,132 |

Tabelle 8.537: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von 3-Phenylpropanal mit Methanol, Bezugsgröße 3-Phenylpropanal, $T = 273\text{ K}$

| $n_{3-P}^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I |
|-----------------|-------------|-----------|----------------|--------|
| 38,6 | 60,2 | 56,53 | 10,04 | 567,69 |
| 48,7 | 49,8 | 109,55 | 7,11 | 779,29 |
| 58,6 | 39,6 | - | - | - |

Tabelle 8.538: Pseudogleichgewichtskonstanten K_x , Gleichgewichtskonstanten K_γ und Gleichgewichtskonstanten K der Reaktion von 3-Phenylpropanal mit Methanol, Bezugsgröße Methanol, $T = 273\text{ K}$

| $n_{3-P}^{(0)}$ | $n_M^{(0)}$ | $K_{x,I}$ | $K_{\gamma,I}$ | K_I |
|-----------------|-------------|-----------|----------------|-------|
| 38,6 | 60,2 | 13,89 | 4,18 | 58,11 |
| 48,7 | 49,8 | 10,80 | 1,81 | 19,58 |
| 58,6 | 39,6 | 2,60 | 0,56 | 1,46 |

8.2 Quantenchemie

8.2.1 Beispiel für Gaussian-Eingabedatei

Die erzeugten Geometrien werden durch eine Befehlszeile ergänzt, die alle Schritte, die durchlaufen werden, festlegt. Das folgende Beispiel ist eine Eingabedatei für Gaussian 03 für das Molekül 1-Methoxyethanol:

B3LYP/6-31G(d) Pop=(minimal,) opt=(tight,CalcAll) int=ultrafine freq=ReadIsotopes
Geometrieoptimierung und Frequenzberechnung Gasphase

```
0 1
c
c      1      cc2
h      2      hc3      1      hcc3
h      2      hc4      1      cc4      3      dih4
h      2      hc5      1      hcc5      3      dih5
c      1      cc6      2      ccc6      3      dih6
h      1      hc7      2      hcc7      6      dih7
h      1      hc8      2      hcc8      6      dih8
o      6      oc9      1      occ9      2      dih9
h      6      hc10     9      hco10     1      dih10
```

```
cc2      1.450000
hc3      1.089000
hcc3     109.471
hc4      1.089000
hcc4     109.471
dih4     120.000
hc5      1.089000
hcc5     109.471
dih5     240.000
cc6      1.450000
ccc6     109.471
dih6     120.000
hc7      1.089000
hcc7     109.471
dih7     120.000
hc8      1.089000
hcc8     109.471
dih8     240.000
oc9      1.220000
occ9     120.000
dih9     120.000
hc10     1.089000
hco10    120.000
```

dih10 180.000

298.15 1.0 0.9804

12

12

1

1

1

12

1

1

16

1

Im gezeigten Beispiel werden die quantenchemische Methode (B3LYP), der Basisatz (6-31G(d)), der Umfang der Ausgabe in der Ausgabedatei (Pop=(minimal,)) und die ablaufenden Rechenschritte festgelegt. Der Befehl 'opt' gibt an, dass eine Geometrieoptimierung durchgeführt werden soll und (tight,CalcAll) int=ultrafine bestimmen die Art der Geometrieoptimierung. Mit freq wird festgelegt, dass im Anschluss an die Geometrieoptimierung eine Frequenzberechnung durchgeführt wird. Mit ReadIsotopes können die Parameter der Frequenzberechnung bestimmt werden, wie z.B. Temperatur, Druck oder Skalierungsfaktoren. Im hier gezeigten Beispiel beträgt die Temperatur 298.15 K, der Druck ist 1.0 bar und der Skalierungsfaktor hat den Wert 0.9804.

8.2.2 Konformere und Energien der Moleküle

In den folgenden Tabellen sind alle gefundenen Konformere für alle berechneten Moleküle und ihre Auftrittswahrscheinlichkeit zusammengefasst.

8.2.2.1 B3LYP 6-31G(d)

Für die Kombination aus B3LYP und 6-31G(d) wurde an zahlreichen Startgeometrien (je nach Moleküle mehrere Hundert) Berechnungen durchgeführt, um möglichst alle Konformere jedes untersuchten Moleküls zu ermitteln.

8.2.2.1.1 Aldehyde

Tabelle 8.539: Energien und Boltzmannverteilung der Energien für alle ermittelten Konformere von Acetaldehyd

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|-------------|---------------------|-----------------------------|
| Acetaldehyd | -153,830120 | 1,0 |

Tabelle 8.540: Energien und Boltzmannverteilung der Energien für alle ermittelten Konformere von Propanal

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|--------------|---------------------|-----------------------------|
| Propanal - a | -193,14534442 | 0,4692 |
| Propanal - b | -193,14534421 | 0,4691 |
| Propanal - c | -193,143427811 | 0,0616 |

Tabelle 8.541: Energien und Boltzmannverteilung der Energien für alle ermittelten Konformere von Butanal

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|-------------|---------------------|-----------------------------|
| Butanal - a | -232,45896509 | 0,5215 |
| Butanal - a | -232,45853397 | 0,3303 |
| Butanal - a | -232,45725232 | 0,0850 |
| Butanal - a | -232,45697195 | 0,0632 |

Tabelle 8.542: Energien und Boltzmannverteilung der Energien für alle ermittelten Konformere von Heptanal

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|--------------|---------------------|-----------------------------|
| Heptanal - a | -350,400197 | 0,3304 |
| Heptanal - b | -350,400199 | 0,3184 |
| Heptanal - c | -350,399865 | 0,1390 |
| Heptanal - d | -350,398570 | 0,0782 |
| Heptanal - e | -350,398318 | 0,0576 |
| Heptanal - f | -350,398345 | 0,0287 |
| Heptanal - g | -350,397130 | 0,0200 |
| Heptanal - h | -350,397597 | 0,0150 |
| Heptanal - i | -350,397039 | 0,0061 |
| Heptanal - j | -350,397965 | 0,0044 |
| Heptanal - k | -350,395837 | 0,0025 |

Tabelle 8.543: Energien und Boltzmannverteilung der Energien für alle ermittelten Konformere von Decanal

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|-------------|---------------------|-----------------------------|
| Decanal - a | -468,34135074 | 0,2997 |
| Decanal - b | -468,34134777 | 0,2988 |
| Decanal - c | -468,34101497 | 0,2100 |
| Decanal - d | -468,33973147 | 0,0539 |
| Decanal - e | -468,33947586 | 0,0411 |
| Decanal - f | -468,33909334 | 0,0274 |
| Decanal - g | -468,33876375 | 0,0194 |
| Decanal - h | -468,33843691 | 0,0137 |
| Decanal - i | -468,33829088 | 0,0117 |
| Decanal - j | -468,33820640 | 0,0107 |
| Decanal - k | -468,33817329 | 0,0104 |
| Decanal - l | -468,33702838 | 0,0031 |

Tabelle 8.544: Energien und Boltzmannverteilung der Energien für alle ermittelten Konformere von 2-Chlorbenzaldehyd

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|------------------------|---------------------|-----------------------------|
| 2-Chlorbenzaldehyd - a | -805,165210 | 0,4954 |
| 2-Chlorbenzaldehyd - b | -805,165209 | 0,4949 |
| 2-Chlorbenzaldehyd - c | -805,160843 | 0,0049 |
| 2-Chlorbenzaldehyd - d | -805,160842 | 0,0049 |

Tabelle 8.545: Energien und Boltzmannverteilung der Energien für alle ermittelten Konformere von 3-Phenylpropanal

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|----------------------|---------------------|-----------------------------|
| 3-Phenylpropanal - a | -424,19505238 | 0,5755 |
| 3-Phenylpropanal - b | -424,19452300 | 0,3285 |
| 3-Phenylpropanal - c | -424,19278543 | 0,0522 |
| 3-Phenylpropanal - d | -424,19185592 | 0,0195 |
| 3-Phenylpropanal - e | -424,19170788 | 0,0167 |
| 3-Phenylpropanal - f | -424,19097596 | 0,0077 |

8.2.2.1.2 Alkohole

Tabelle 8.546: Energien und Boltzmannverteilung der Energien für alle ermittelten Konformere von Methanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|------------|---------------------|-----------------------------|
| Methanol | -115,714405 | 1,0 |

Tabelle 8.547: Energien und Boltzmannverteilung der Energien für alle ermittelten Konformere von Ethanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|-------------|---------------------|-----------------------------|
| Ethanol - a | -155,03428990 | 0,6270 |
| Ethanol - b | -155,03379939 | 0,3730 |

Tabelle 8.548: Energien und Boltzmannverteilung der Energien für alle ermittelten Konformere von 1-Propanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|----------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Propanol - a | -194,348407859 | 0,2721 |
| 1-Propanol - b | -194,348150057 | 0,2071 |
| 1-Propanol - c | -194,348021229 | 0,1807 |
| 1-Propanol - d | -194,347721693 | 0,1316 |
| 1-Propanol - e | -194,347502256 | 0,1043 |
| 1-Propanol - f | -194,347501136 | 0,1042 |

8.2.2.1.3 Halbacetale 1

Tabelle 8.549: Energien und Boltzmannverteilung der Energien für alle ermittelten Konformere von 1-Methoxyethanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|----------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Methoxyethanol - a | -269,56683318 | 0,9453 |
| 1-Methoxyethanol - b | -269,56371152 | 0,0346 |
| 1-Methoxyethanol - c | -269,56278510 | 0,0130 |
| 1-Methoxyethanol - d | -269,56199409 | 0,0056 |
| 1-Methoxyethanol - e | -269,56050320 | 0,0012 |
| 1-Methoxyethanol - f | -269,55935092 | 0,0003 |

Tabelle 8.550: Energien und Boltzmannverteilung der Energien für alle ermittelten Konformere von 1-Ethoxyethanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|---------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Ethoxyethanol - a | -308,885803120 | 0,6641 |
| 1-Ethoxyethanol - b | -308,884391262 | 0,1489 |
| 1-Ethoxyethanol - c | -308,884312180 | 0,1369 |
| 1-Ethoxyethanol - d | -308,882629061 | 0,0230 |
| 1-Ethoxyethanol - e | -308,881949329 | 0,0112 |
| 1-Ethoxyethanol - f | -308,881023152 | 0,0042 |
| 1-Ethoxyethanol - g | -308,881023152 | 0,0042 |
| 1-Ethoxyethanol - h | -308,880659769 | 0,0029 |
| 1-Ethoxyethanol - i | -308,880221671 | 0,0018 |
| 1-Ethoxyethanol - j | -308,879607700 | 0,0009 |
| 1-Ethoxyethanol - k | -308,879001640 | 0,0005 |
| 1-Ethoxyethanol - l | -308,878979110 | 0,0005 |
| 1-Ethoxyethanol - m | -308,878738674 | 0,0004 |
| 1-Ethoxyethanol - n | -308,878410380 | 0,0003 |
| 1-Ethoxyethanol - o | -308,878332783 | 0,0002 |
| 1-Ethoxyethanol - p | -308,876747772 | 4,54E-05 |
| 1-Ethoxyethanol - q | -308,851238026 | 8,38E-17 |

Tabelle 8.552: Energien und Boltzmannverteilung der Energien für alle ermittelten Konformere von 1-Propoxyethanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|----------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Propoxyethanol - a | -348,199730365 | 0,39858 |
| 1-Propoxyethanol - b | -348,199432632 | 0,29078 |
| 1-Propoxyethanol - c | -348,198312227 | 0,08876 |
| 1-Propoxyethanol - d | -348,198182186 | 0,07734 |
| 1-Propoxyethanol - e | -348,198136762 | 0,07371 |
| 1-Propoxyethanol - f | -348,196650107 | 0,01527 |
| 1-Propoxyethanol - g | -348,196502792 | 0,01306 |
| 1-Propoxyethanol - h | -348,196316835 | 0,01073 |
| 1-Propoxyethanol - i | -348,195998171 | 0,00765 |
| 1-Propoxyethanol - j | -348,195878665 | 0,00674 |
| 1-Propoxyethanol - k | -348,195661990 | 0,00536 |
| 1-Propoxyethanol - l | -348,195006806 | 0,00268 |
| 1-Propoxyethanol - m | -348,194963743 | 0,00256 |
| 1-Propoxyethanol - n | -348,194694626 | 0,00192 |
| 1-Propoxyethanol - o | -348,194694626 | 0,00192 |
| 1-Propoxyethanol - p | -348,194461533 | 0,00150 |
| 1-Propoxyethanol - q | -348,193275488 | 0,00043 |
| 1-Propoxyethanol - r | -348,192843587 | 0,00027 |
| 1-Propoxyethanol - s | -348,192815895 | 0,00026 |
| 1-Propoxyethanol - t | -348,192567794 | 0,00020 |
| 1-Propoxyethanol - u | -348,192131114 | 0,00013 |
| 1-Propoxyethanol - v | -348,192049215 | 0,00012 |
| 1-Propoxyethanol - w | -348,190684512 | 0,00003 |

Tabelle 8.553: Energien und Boltzmannverteilung der Energien für alle ermittelten Konformere von 1-Methoxy-1-Propanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|--------------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Methoxy-1-Propanol - a | -308,88095557 | 0,4446 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - b | -308,88078052 | 0,3693 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - c | -308,87990796 | 0,1466 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - d | -308,87752261 | 0,0117 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - e | -308,87744346 | 0,0108 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - f | -308,87682353 | 0,0056 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - g | -308,87667243 | 0,0048 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - h | -308,87579584 | 0,0019 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - i | -308,87572305 | 0,0017 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - j | -308,87536643 | 0,0012 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - k | -308,87488964 | 0,0007 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - l | -308,87453405 | 0,0005 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - m | -308,87390541 | 0,0003 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - n | -308,87353362 | 0,0002 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - o | -308,87324005 | 0,0001 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - p | -308,87309416 | 0,0001 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - q | -308,86847849 | 8,11E-07 |

Tabelle 8.554: Energien und Boltzmannverteilung der Energien für alle ermittelten Konformere von 1-Ethoxy-1-Propanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|-------------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Ethoxy-1-Propanol - a | -348,199960351 | 0,3163 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - b | -348,199763373 | 0,2567 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - c | -348,198910669 | 0,1040 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - d | -348,198537279 | 0,0701 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - e | -348,198501745 | 0,0675 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - f | -348,198383146 | 0,0595 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - g | -348,198260952 | 0,0523 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - h | -348,197486809 | 0,0230 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - i | -348,197394980 | 0,0209 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - j | -348,196430032 | 0,0075 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - k | -348,196385085 | 0,0072 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - l | -348,195976288 | 0,0047 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - m | -348,195872477 | 0,0042 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - n | -348,194833925 | 0,0014 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - o | -348,194773175 | 0,0013 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - p | -348,194475005 | 0,0009 |

| | | |
|-------------------------|----------------|----------|
| 1-Ethoxy-1-Propanol - q | -348,194416849 | 0,0009 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - r | -348,193991311 | 0,0006 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - s | -348,193685408 | 0,0004 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - t | -348,192953195 | 0,0002 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - u | -348,192936994 | 0,0002 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - v | -348,192846703 | 0,0002 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - w | -348,192283465 | 0,0001 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - x | -348,192104426 | 0,0001 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - y | -348,190541711 | 1,47E-05 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - z | -348,165322065 | 3,70E-17 |

Tabelle 8.555: Energien und Boltzmannverteilung der Energien für alle ermittelten Konformere von 1-Propoxy-1-Propanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|--------------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Propoxy-1-Propanol - a | -387,513853364 | 0,1326 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - b | -387,513711420 | 0,1141 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - c | -387,513693050 | 0,1119 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - d | -387,513665284 | 0,1086 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - e | -387,513590336 | 0,1003 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - f | -387,513390818 | 0,0812 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - g | -387,512830058 | 0,0448 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - h | -387,512701684 | 0,0391 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - i | -387,512539410 | 0,0329 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - j | -387,512368577 | 0,0275 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - k | -387,512367109 | 0,0274 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - l | -387,512299214 | 0,0255 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - m | -387,512283988 | 0,0251 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - n | -387,512200274 | 0,0230 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - o | -387,512132124 | 0,0214 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - p | -387,512126956 | 0,0213 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - q | -387,511413124 | 0,0100 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - r | -387,511263181 | 0,0085 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - s | -387,511233043 | 0,0083 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - t | -387,511183463 | 0,0078 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - u | -387,510443692 | 0,0036 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - v | -387,510408722 | 0,0034 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - w | -387,510304198 | 0,0031 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - x | -387,510260247 | 0,0029 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - y | -387,510113339 | 0,0025 |

| | | |
|---------------------------|----------------|----------|
| 1-Propoxy-1-Propanol - z | -387,510069600 | 0,0024 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - aa | -387,510023317 | 0,0023 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - ab | -387,509901655 | 0,0020 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - ac | -387,509587561 | 0,0014 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - ad | -387,508820782 | 0,0006 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - ae | -387,508774865 | 0,0006 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - af | -387,508748051 | 0,0006 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - ag | -387,508500355 | 0,0005 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - ah | -387,508443791 | 0,0004 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - ai | -387,508222262 | 0,0003 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - aj | -387,508210848 | 0,0003 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - ak | -387,508108092 | 0,0003 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - al | -387,507922717 | 0,0002 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - am | -387,507624178 | 0,0002 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - an | -387,507343795 | 0,0001 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - ao | -387,507243659 | 0,0001 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - ap | -387,506842256 | 0,0001 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - aq | -387,506798545 | 0,0001 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - ar | -387,506775554 | 0,0001 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - as | -387,506690040 | 0,0001 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - at | -387,506495772 | 0,0001 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - au | -387,506476767 | 0,0001 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - av | -387,506352469 | 4,68E-05 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - aw | -387,505975044 | 3,14E-05 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - ax | -387,505820880 | 2,67E-05 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - ay | -387,504834607 | 9,38E-06 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - az | -387,504474100 | 6,40E-06 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - ba | -387,497937035 | 6,28E-09 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - bb | -387,483583255 | 1,56E-15 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - bc | -387,483583246 | 1,56E-15 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - bd | -387,446986691 | 2,24E-32 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - be | -387,335849807 | 1,61E-83 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - bf | -387,324779626 | 1,29E-88 |

Tabelle 8.556: Energien und Boltzmannverteilung der Energien für alle ermittelten Konformere von 1-Methoxy-1-Butanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|--------------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Methoxy-1-Butanol - a | -348,19460014 | 0,32697 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - b | -348,19437766 | 0,25833 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - c | -348,19352584 | 0,10480 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - d | -348,19343716 | 0,09541 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - e | -348,19333997 | 0,08607 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - f | -348,19266078 | 0,04192 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - g | -348,19256096 | 0,03772 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - h | -348,19157235 | 0,01324 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - i | -348,19113015 | 0,00829 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - j | -348,19112867 | 0,00827 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - k | -348,19042186 | 0,00391 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - l | -348,19028558 | 0,00339 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - m | -348,18992605 | 0,00232 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - n | -348,18971468 | 0,00185 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - o | -348,18943304 | 0,00137 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - p | -348,18933440 | 0,00124 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - q | -348,18930912 | 0,00120 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - r | -348,18920166 | 0,00107 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - s | -348,18898732 | 0,00086 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - t | -348,18850783 | 0,00052 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - v | -348,18831453 | 0,00042 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - w | -348,18813051 | 0,00035 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - x | -348,18745914 | 0,00017 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - y | -348,18719094 | 0,00013 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - z | -348,18682201 | 0,00009 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - aa | -348,18677944 | 0,00008 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - ab | -348,18535889 | 0,00002 |

Tabelle 8.557: Energien und Boltzmannverteilung der Energien für alle ermittelten Konformere von 1-Ethoxy-1-Butanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|------------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Ethoxy-1-Butanol - a | -387,51360453 | 0,2381 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - b | -387,51335578 | 0,1829 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - c | -387,51253006 | 0,0763 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - d | -387,51244424 | 0,0697 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - e | -387,51232453 | 0,0614 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - f | -387,51217598 | 0,0524 |

| | | |
|-------------------------|---------------|----------|
| 1-Ethoxy-1-Butanol - g | -387,51213996 | 0,0505 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - h | -387,51196862 | 0,0421 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - i | -387,51184972 | 0,0371 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - j | -387,51162877 | 0,0294 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - k | -387,51109206 | 0,0166 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - l | -387,51101268 | 0,0153 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - m | -387,51100514 | 0,0152 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - n | -387,51100030 | 0,0151 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - o | -387,51092923 | 0,0140 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - p | -387,51083489 | 0,0127 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - q | -387,51056928 | 0,0096 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - r | -387,51022976 | 0,0067 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - s | -387,51006854 | 0,0056 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - t | -387,51005550 | 0,0056 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - u | -387,51004631 | 0,0055 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - v | -387,51003410 | 0,0054 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - w | -387,51001335 | 0,0053 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - x | -387,50989822 | 0,0047 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - y | -387,50957397 | 0,0033 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - z | -387,50948737 | 0,0030 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - aa | -387,50943260 | 0,0029 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - ab | -387,50908337 | 0,0020 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - ac | -387,50906117 | 0,0019 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - ad | -387,50881825 | 0,0015 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - ae | -387,50865286 | 0,0013 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - af | -387,50846976 | 0,0010 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - ag | -387,50838983 | 0,0010 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - ah | -387,50836075 | 0,0009 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - ai | -387,50823855 | 0,0008 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - aj | -387,50807730 | 0,0007 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - ak | -387,50807139 | 0,0007 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - al | -387,50788830 | 0,0006 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - am | -387,50761254 | 0,0004 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - an | -387,50747170 | 0,0004 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - ao | -387,50655801 | 1,37E-04 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - ap | -387,50654288 | 1,34E-04 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - aq | -387,50646014 | 1,23E-04 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - ar | -387,50616867 | 9,05E-05 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - as | -387,50579239 | 6,07E-05 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - at | -387,50420132 | 1,13E-05 |

| | | |
|-------------------------|---------------|----------|
| 1-Ethoxy-1-Butanol - au | -387,50271581 | 2,34E-06 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - av | -387,50125252 | 4,96E-07 |
| 1-Ethoxy-1-Butanol - aw | -387,47865827 | 2,01E-17 |

Tabelle 8.558: Energien und Boltzmannverteilung der Energien für alle ermittelten Konformere von 1-Propoxy-1-Butanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|--------------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Propoxy-1-Butanol - a | -426,82749842 | 0,1207 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - b | -426,82735464 | 0,1037 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - c | -426,82728601 | 0,0964 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - d | -426,82725485 | 0,0933 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - e | -426,82723922 | 0,0917 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - f | -426,82698209 | 0,0699 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - g | -426,82644864 | 0,0397 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - h | -426,82633182 | 0,0351 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - i | -426,82632120 | 0,0347 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - j | -426,82625859 | 0,0325 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - k | -426,82622665 | 0,0314 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - l | -426,82618851 | 0,0302 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - m | -426,82615853 | 0,0292 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - n | -426,82607304 | 0,0267 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - o | -426,82600658 | 0,0249 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - p | -426,82595584 | 0,0236 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - q | -426,82592156 | 0,0227 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - r | -426,82572008 | 0,0184 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - s | -426,82571359 | 0,0182 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - t | -426,82525941 | 0,0113 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - u | -426,82483929 | 0,0072 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - v | -426,82475698 | 0,0066 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - w | -426,82467291 | 0,0061 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - x | -426,82419235 | 0,0036 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - y | -426,82392742 | 0,0027 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - z | -426,82388192 | 0,0026 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - aa | -426,82378024 | 0,0024 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - ab | -426,82374950 | 0,0023 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - ac | -426,82372308 | 0,0022 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - ad | -426,82353062 | 0,0018 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - ae | -426,82328043 | 0,0014 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - af | -426,82306229 | 0,0011 |

| | | |
|--------------------------|---------------|----------|
| 1-Propoxy-1-Butanol - ag | -426,82295054 | 0,0010 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - ah | -426,82280727 | 0,0008 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - ai | -426,82250172 | 0,0006 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - aj | -426,82234156 | 0,0005 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - ak | -426,82213674 | 0,0004 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - al | -426,82207109 | 0,0004 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - am | -426,82205927 | 0,0004 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - an | -426,82191805 | 0,0003 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - ao | -426,82186450 | 0,0003 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - ap | -426,82171611 | 0,0003 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - aq | -426,82157672 | 0,0002 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - ar | -426,82124442 | 0,0002 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - as | -426,82118821 | 0,0002 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - at | -426,82039303 | 6,51E-05 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - au | -426,82038681 | 6,47E-05 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - av | -426,82030310 | 5,92E-05 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - aw | -426,81950798 | 2,55E-05 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - ax | -426,81813826 | 5,98E-06 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - ay | -426,81703210 | 1,85E-06 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - az | -426,81498488 | 2,12E-07 |
| 1-Propoxy-1-Butanol - ba | -426,79103203 | 2,03E-18 |

Tabelle 8.559: Energien und Boltzmannverteilung der Energien für alle ermittelten Konformere von 1-Methoxy-1-Heptanol

| Konformere | Energie [E _h /n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|--------------------------|-----------------------------|-----------------------------|
| 1-Methoxy-1-Heptanol - a | -466.135799310 | 0.1645 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - b | -466.135557108 | 0.1272 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - c | -466.134785114 | 0.0562 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - d | -466.134571429 | 0.0448 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - e | -466.134488883 | 0.0410 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - f | -466.134476549 | 0.0405 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - g | -466.134447833 | 0.0393 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - h | -466.134444843 | 0.0392 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - i | -466.134441266 | 0.0390 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - j | -466.134426998 | 0.0384 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - k | -466.134302037 | 0.0337 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - l | -466.134278697 | 0.0329 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - m | -466.134236441 | 0.0314 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - n | -466.13420708 | 0.0305 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - o | -466.13420594 | 0.0304 |

| | | |
|---------------------------|----------------|----------|
| 1-Methoxy-1-Heptanol - p | -466.134197279 | 0.0301 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - q | -466.133931061 | 0.0227 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - r | -466.133800956 | 0.0198 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - s | -466.133473183 | 0.0140 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - t | -466.133431587 | 0.0134 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - u | -466.133336261 | 0.0121 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - v | -466.13322339 | 0.0107 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - w | -466.13320868 | 0.0106 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - x | -466.13315926 | 0.0100 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - y | -466.133148724 | 0.0099 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - z | -466.133037411 | 0.0088 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - aa | -466.132796423 | 0.0068 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - ab | -466.132510839 | 0.0051 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - ac | -466.132320658 | 0.0041 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - ad | -466.132320657 | 0.0041 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - ae | -466.132318611 | 0.0041 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - af | -466.13229607 | 0.0040 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - ag | -466.132158481 | 0.0035 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - ah | -466.132014173 | 0.0030 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - ai | -466.131618804 | 0.0020 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - aj | -466.131209622 | 0.0013 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - ak | -466.131130307 | 0.0012 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - al | -466.131046627 | 0.0011 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - am | -466.131038949 | 0.0011 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - an | -466.130959455 | 0.0010 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - ao | -466.130839079 | 0.0009 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - ap | -466.130632607 | 0.0007 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - aq | -466.130525358 | 0.0006 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - ar | -466.13050932 | 0.0006 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - as | -466.130495001 | 0.0006 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - at | -466.130326488 | 0.0005 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - au | -466.13032649 | 0.0005 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - av | -466.130150938 | 0.0004 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - aw | -466.13004779 | 0.0004 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - ax | -466.129877406 | 0.0003 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - ay | -466.129872021 | 0.0003 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - az | -466.129584364 | 0.0002 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - ba | -466.129320767 | 0.0002 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - bb | -466.128715827 | 0.0001 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - bc | -466.127975146 | 4.14E-05 |

| | | |
|---------------------------|----------------|----------|
| 1-Methoxy-1-Heptanol - bd | -466.127975146 | 4.14E-05 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - be | -466.126171000 | 6.13E-06 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol - bf | -466.125992658 | 5.07E-06 |

Tabelle 8.560: Energien und Boltzmannverteilung der Energien für alle ermittelten Konformere von 1-Methoxy-1-Decanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|--------------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Methoxy-1-Decanol - a | -584,07694835 | 0,1423 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - b | -584,07670323 | 0,1098 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - c | -584,07593219 | 0,0485 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - d | -584,07571796 | 0,0387 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - e | -584,07565134 | 0,0360 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - f | -584,07561806 | 0,0348 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - g | -584,07559633 | 0,0340 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - h | -584,07559279 | 0,0339 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - i | -584,07559030 | 0,0338 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - j | -584,07558762 | 0,0337 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - k | -584,07544696 | 0,0290 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - l | -584,07544533 | 0,0290 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - m | -584,07539021 | 0,0273 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - n | -584,07536809 | 0,0267 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - o | -584,07535628 | 0,0264 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - p | -584,07535255 | 0,0263 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - q | -584,07535095 | 0,0262 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - r | -584,07535062 | 0,0262 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - s | -584,07507411 | 0,0196 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - t | -584,07494063 | 0,0170 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - u | -584,07463608 | 0,0123 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - v | -584,07458049 | 0,0116 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - w | -584,07457916 | 0,0116 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - x | -584,07457591 | 0,0115 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - y | -584,07457109 | 0,0115 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - z | -584,07457095 | 0,0115 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - aa | -584,07448645 | 0,0105 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - ab | -584,07436977 | 0,0093 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - ac | -584,07436699 | 0,0092 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - ad | -584,07436511 | 0,0092 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - ae | -584,07435269 | 0,0091 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - af | -584,07430361 | 0,0086 |

| | | |
|--------------------------|---------------|----------|
| 1-Methoxy-1-Decanol - ag | -584,07430297 | 0,0086 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - ah | -584,07429908 | 0,0086 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - ai | -584,07429002 | 0,0085 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - aj | -584,07427390 | 0,0084 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - ak | -584,07427044 | 0,0083 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - al | -584,07420307 | 0,0078 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - am | -584,07365558 | 0,0044 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - an | -584,07346495 | 0,0036 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - ao | -584,07346143 | 0,0035 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - ap | -584,07333924 | 0,0031 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - aq | -584,07315749 | 0,0026 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - ar | -584,07276131 | 0,0017 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - as | -584,07227821 | 0,0010 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - at | -584,07219972 | 0,0009 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - au | -584,07212034 | 0,0009 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - av | -584,07198817 | 0,0007 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - aw | -584,07177399 | 0,0006 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - ax | -584,07171188 | 0,0006 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - ay | -584,07153567 | 0,0005 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - az | -584,07121473 | 0,0003 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - ba | -584,07102517 | 0,0003 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - bb | -584,07046512 | 0,0001 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - bc | -584,0698683 | 0,0001 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - bd | -584,06912305 | 3,58E-05 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - be | -584,06731476 | 5,27E-06 |
| 1-Methoxy-1-Decanol - bf | -584,06715967 | 4,48E-06 |

Tabelle 8.561: Energien und Boltzmannverteilung der Energien für alle ermittelten Konformere von 1-Methoxy-3-Phenylpropanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|--------------------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Methoxy-3-Phenylpropanol - a | -539,93078612 | 0,5330 |
| 1-Methoxy-3-Phenylpropanol - b | -539,93058515 | 0,4308 |
| 1-Methoxy-3-Phenylpropanol - c | -539,92732785 | 0,0137 |
| 1-Methoxy-3-Phenylpropanol - d | -539,92682689 | 0,0080 |
| 1-Methoxy-3-Phenylpropanol - e | -539,92667856 | 0,0069 |
| 1-Methoxy-3-Phenylpropanol - f | -539,92635552 | 0,0049 |
| 1-Methoxy-3-Phenylpropanol - g | -539,92516118 | 0,0014 |
| 1-Methoxy-3-Phenylpropanol - h | -539,92476706 | 0,0009 |
| 1-Methoxy-3-Phenylpropanol - i | -539,92334425 | 0,0002 |
| 1-Methoxy-3-Phenylpropanol - j | -539,92332709 | 0,0002 |
| 1-Methoxy-3-Phenylpropanol - k | -539,92260731 | 9,22E-05 |
| 1-Methoxy-3-Phenylpropanol - l | -539,92090775 | 1,52E-05 |

Tabelle 8.562: Energien und Boltzmannverteilung der Energien für alle ermittelten Konformere von 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|------------------------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol - a | -920,89362096 | 0,6621 |
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol - b | -920,89208916 | 0,1307 |
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol - c | -920,89196279 | 0,1143 |
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol - d | -920,89127811 | 0,0554 |
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol - e | -920,89026080 | 0,0189 |
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol - f | -920,88940536 | 0,0076 |
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol - g | -920,88893062 | 0,0046 |
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol - h | -920,88853843 | 0,0030 |
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol - i | -920,88820339 | 0,0021 |
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol - j | -920,88627316 | 0,0003 |
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol - k | -920,88613703 | 0,0002 |
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol - l | -920,88597345 | 0,0002 |
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol - m | -920,88525295 | 9,37E-05 |
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol - n | -920,88518043 | 8,68E-05 |
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol - o | -920,88516733 | 8,56E-05 |
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol - p | -920,88496071 | 6,88E-05 |
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol - q | -920,88446498 | 4,07E-05 |
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol - r | -920,88418543 | 3,03E-05 |
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol - s | -920,88377683 | 1,96E-05 |
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol - t | -920,88368779 | 1,79E-05 |

Tabelle 8.563: Energien und Boltzmannverteilung der Energien für alle ermittelten Konformere von 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|-----------------------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol - a | -960,21269905 | 0,4933 |
| 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol - b | -960,21131234 | 0,1136 |
| 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol - c | -960,21124375 | 0,1056 |
| 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol - d | -960,21113112 | 0,0937 |
| 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol - e | -960,21104063 | 0,0852 |
| 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol - f | -960,21023761 | 0,0364 |
| 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol - g | -960,20946708 | 0,0161 |
| 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol - h | -960,20946454 | 0,0160 |
| 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol - i | -960,20945027 | 0,0158 |
| 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol - j | -960,20913859 | 0,0114 |
| 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol - k | -960,20852175 | 0,0059 |
| 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol - l | -960,20843053 | 0,0054 |
| 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol - m | -960,20661686 | 0,0008 |
| 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol - n | -960,20622464 | 0,0005 |
| 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol - o | -960,20531035 | 0,0002 |
| 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol - p | -960,20502485 | 0,0001 |
| 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol - q | -960,20340491 | 2,62E-05 |
| 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol - r | -960,20299816 | 1,70E-05 |
| 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol - s | -960,20265049 | 1,18E-05 |

Tabelle 8.564: Energien und Boltzmannverteilung der Energien für alle ermittelten Konformere von 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|------------------------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol - a | -999,52654673 | 0,2751 |
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol - b | -999,52635474 | 0,2245 |
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol - c | -999,52633404 | 0,2196 |
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol - d | -999,52520918 | 0,0667 |
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol - e | -999,52500904 | 0,0540 |
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol - f | -999,52493493 | 0,0499 |
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol - g | -999,52489224 | 0,0477 |
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol - h | -999,52388953 | 0,0165 |
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol - i | -999,52333176 | 0,0091 |
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol - j | -999,52321334 | 0,0081 |
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol - k | -999,52308345 | 0,0070 |
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol - l | -999,52286379 | 0,0056 |
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol - m | -999,52230728 | 0,0031 |
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol - n | -999,52216496 | 0,0027 |
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol - o | -999,52203364 | 0,0023 |
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol - p | -999,52200825 | 0,0022 |
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol - q | -999,52200824 | 0,0022 |
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol - r | -999,52134564 | 0,0011 |
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol - s | -999,52113522 | 0,0009 |
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol - t | -999,52100394 | 0,0008 |
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol - u | -999,52042353 | 0,0004 |
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol - v | -999,51995910 | 0,0003 |
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol - w | -999,51894820 | 0,0001 |
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol - x | -999,51703592 | 1,16E-05 |
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol - y | -999,51672580 | 8,36E-06 |
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol - z | -999,51627272 | 5,17E-06 |

8.2.2.2 B3LYP cc-pVTZ

Für die Kombination aus B3LYP und cc-pVTZ war es aus Zeitgründen nicht möglich, dieselbe Konformersuche wie mit dem kleineren Basissatz 6-31G(d) durchzuführen. In der Regel wurden mit dem größeren Basissatz nur die Konformere berechnet, die mit 6-31G(d) die größten Auftrittswahrscheinlichkeiten besitzen.

8.2.2.2.1 Aldehyde

Tabelle 8.565: Energien und Boltzmannverteilung der Energien der Konformere von Acetaldehyd

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|-------------|---------------------|-----------------------------|
| Acetaldehyd | -153,893531 | 1,0 |

Tabelle 8.566: Energien und Boltzmannverteilung der Energien der Konformere von Propanal

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|--------------|---------------------|-----------------------------|
| Propanal - a | -193,222477 | 0,4606 |
| Propanal - b | -193,222478 | 0,4611 |
| Propanal - c | -193,220803 | 0,0782 |

Tabelle 8.567: Energien und Boltzmannverteilung der Energien der Konformere von Butanal

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|-------------|---------------------|-----------------------------|
| Butanal - a | -232,550057 | 0,5099 |
| Butanal - a | -232,549497 | 0,2818 |
| Butanal - a | -232,548735 | 0,1257 |
| Butanal - a | -232,548338 | 0,0826 |

Tabelle 8.568: Energien und Boltzmannverteilung der Energien der Konformere von Heptanal

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|--------------|---------------------|-----------------------------|
| Heptanal - a | -350,533571 | 0,2976 |
| Heptanal - b | -350,533573 | 0,2983 |
| Heptanal - c | -350,533090 | 0,1788 |
| Heptanal - d | -350,532322 | 0,0793 |
| Heptanal - e | -350,531932 | 0,0525 |
| Heptanal - f | -350,531447 | 0,0314 |
| Heptanal - g | -350,531127 | 0,0224 |
| Heptanal - h | -350,530806 | 0,0159 |
| Heptanal - i | -350,530052 | 0,0072 |
| Heptanal - j | -350,530661 | 0,0137 |
| Heptanal - k | -350,529241 | 0,0030 |

Tabelle 8.569: Energien und Boltzmannverteilung der Energien der Konformere von 2-Chlorbenzaldehyd

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|------------------------|---------------------|-----------------------------|
| 2-Chlorbenzaldehyd - a | -805,165210 | 0,4934 |
| 2-Chlorbenzaldehyd - b | -805,165209 | 0,4939 |
| 2-Chlorbenzaldehyd - c | -805,160843 | 0,0063 |
| 2-Chlorbenzaldehyd - d | -805,160842 | 0,0063 |

8.2.2.2.2 Alkohole

Tabelle 8.570: Energien und Boltzmannverteilung der Energien der Konformere von Methanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|------------|---------------------|-----------------------------|
| Methanol | -115,772249 | 1,0 |

Tabelle 8.571: Energien und Boltzmannverteilung der Energien der Konformere von Ethanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|-------------|---------------------|-----------------------------|
| Ethanol - a | -155,105982 | 0,5003 |
| Ethanol - b | -155,105983 | 0,4997 |

Tabelle 8.572: Energien und Boltzmannverteilung der Energien der Konformere von 1-Propanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|----------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Propanol - a | -194,4339580 | 0,1953 |
| 1-Propanol - b | -194,4337290 | 0,1532 |
| 1-Propanol - c | -194,4336900 | 0,1470 |
| 1-Propanol - d | -194,4338370 | 0,1718 |
| 1-Propanol - e | -194,4337310 | 0,1535 |
| 1-Propanol - f | -194,4338770 | 0,1792 |

8.2.2.2.3 Halbacetale 1

Tabelle 8.573: Energien und Boltzmannverteilung der Energien der Konformere von 1-Methoxyethanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|--------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Methoxyethanol-a | -269,682156 | 0,9185 |
| 1-Methoxyethanol-b | -269,679038 | 0,0091 |
| 1-Methoxyethanol-c | -269,679108 | 0,0364 |
| 1-Methoxyethanol-d | -269,677796 | 0,0017 |
| 1-Methoxyethanol-e | -269,676242 | 0,0005 |
| 1-Methoxyethanol-f | -269,675040 | 0,0338 |

Tabelle 8.574: Energien und Boltzmannverteilung der Energien der Konformere von 1-Ethoxyethanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|---------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Ethoxyethanol - a | -309,015233 | 0,7588 |
| 1-Ethoxyethanol - b | -309,013375 | 0,1060 |
| 1-Ethoxyethanol - c | -309,013053 | 0,0753 |
| 1-Ethoxyethanol - d | -309,012001 | 0,0248 |
| 1-Ethoxyethanol - e | -309,012330 | 0,0351 |

Tabelle 8.575: Energien und Boltzmannverteilung der Energien der Konformere von 1-Propoxyethanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|----------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Propoxyethanol - a | -348,342989 | 0,31943 |
| 1-Propoxyethanol - b | -348,342888 | 0,28702 |
| 1-Propoxyethanol - c | -348,341039 | 0,04050 |
| 1-Propoxyethanol - d | -348,340913 | 0,03540 |
| 1-Propoxyethanol - e | -348,342888 | 0,28702 |
| 1-Propoxyethanol - f | -348,339789 | 0,01078 |
| 1-Propoxyethanol - g | -348,339732 | 0,01015 |
| 1-Propoxyethanol - h | -348,339690 | 0,00970 |

Tabelle 8.576: Energien und Boltzmannverteilung der Energien der Konformere von 1-Methoxy-1-Propanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|--------------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Methoxy-1-Propanol - a | -309,010084 | 0,4715 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - b | -309,009848 | 0,3672 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - c | -309,008915 | 0,1367 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - d | -309,006633 | 0,0122 |
| 1-Methoxy-1-Propanol - e | -309,006652 | 0,0124 |

Tabelle 8.577: Energien und Boltzmannverteilung der Energien der Konformere von 1-Ethoxy-1-Propanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|-------------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Ethoxy-1-Propanol - a | -348,343142000 | 0,3067 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - b | -348,342939000 | 0,2473 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - c | -348,341983000 | 0,0899 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - d | -348,341224000 | 0,0402 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - e | -348,341026000 | 0,0326 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - f | -348,342939000 | 0,2473 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - g | -348,340713000 | 0,0234 |
| 1-Ethoxy-1-Propanol - h | -348,340127000 | 0,0126 |

Tabelle 8.578: Energien und Boltzmannverteilung der Energien
der Konformere von 1-Propoxy-1-Propanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|--------------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Propoxy-1-Propanol - a | -387,670835 | 0,1467 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - b | -387,670619 | 0,1167 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - c | -387,670672 | 0,1235 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - d | -387,670672 | 0,1235 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - e | -387,670672 | 0,1235 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - f | -387,670579 | 0,1119 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - g | -387,669682 | 0,0432 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - h | -387,669503 | 0,0358 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - i | -387,669625 | 0,0407 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - j | -387,668867 | 0,0182 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - k | -387,668867 | 0,0182 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - l | -387,668959 | 0,0201 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - m | -387,668959 | 0,0201 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - n | -387,668590 | 0,0136 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - o | -387,668558 | 0,0131 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - p | -387,668833 | 0,0176 |
| 1-Propoxy-1-Propanol - q | -387,668590 | 0,0136 |

Tabelle 8.579: Energien und Boltzmannverteilung der Energien
der Konformere von 1-Methoxy-1-Butanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|-------------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Methoxy-1-Butanol - a | -348,337805 | 0,3467 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - b | -348,337529 | 0,2589 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - c | -348,336518 | 0,0887 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - d | -348,336518 | 0,0887 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - e | -348,336397 | 0,0781 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - f | -348,335340 | 0,0255 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - g | -348,335311 | 0,0247 |
| 1-Methoxy-1-Butanol - h | -348,336518 | 0,0887 |

Für die folgenden Halbacetale konnten aus zeitlichen Gründen nur das Konformer mit der geringsten Energie berechnet werden.

Tabelle 8.580: Energien und Boltzmannverteilung der Energien
der Konformere von 1-Ethoxy-1-Butanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|------------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Ethoxy-1-Butanol - a | -387,670859 | 1,0 |

Tabelle 8.581: Energien und Boltzmannverteilung der Energien
der Konformere von 1-Methoxy-1-Heptanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|--------------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Methoxy-1-Heptanol - a | -466,321278 | 1,0 |

Tabelle 8.582: Energien und Boltzmannverteilung der Energien
der Konformere von 1-Methoxy-1-Decanol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|-------------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Methoxy-1-Decanol - a | -584,304658 | 1,0 |

Tabelle 8.583: Energien und Boltzmannverteilung der Energien
der Konformere von 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|------------------------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol - a | -921,10742300 | 0,6946 |
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol - b | -921,10388300 | 0,0163 |
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol - c | -921,10610100 | 0,1713 |
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol - d | -921,10497600 | 0,0520 |
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol - e | -921,10519700 | 0,0657 |

Tabelle 8.584: Energien und Boltzmannverteilung der Energien
der Konformere von 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|-----------------------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol - a | -960,440539 | 1,0 |

Tabelle 8.585: Energien und Boltzmannverteilung der Energien
der Konformere von 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol

| Konformere | Energie [E_h/n] | Auftrittswahrscheinlichkeit |
|------------------------------------|---------------------|-----------------------------|
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol - a | -999,768189 | 1,0 |

8.2.3 Gleichgewichtskonstanten des Systems Acetaldehyd mit Methanol für verschiedene Methoden

Tabelle 8.586: Gleichgewichtskonstanten für verschiedene Methoden für Acetaldehyd mit Methanol bei 298 K, Variante 2

| ACME | Gasphase | Umrechnung auf flüssige Phase | | | |
|------------------|-----------|-------------------------------|-------------|-------------|---------|
| Methode | K_{ber} | $K_{M./G.}$ | $K_{C./G.}$ | $K_{J./R.}$ | K_W |
| 6-31G | 0,18291 | 0,85228 | 1,16241 | 2,35248 | 1,07461 |
| 6-31G(d) | 0,05885 | 0,27423 | 0,37402 | 0,75693 | 0,34577 |
| 6-31G(d) - scale | 0,07011 | 0,32668 | 0,44556 | 0,90172 | 0,41190 |
| 6-31G(dp) | 0,04827 | 0,22494 | 0,30678 | 0,62087 | 0,28361 |
| 6-31++G(dp) | 0,00024 | 0,00110 | 0,00150 | 0,00304 | 0,00139 |
| 6-311G | 0,06049 | 0,28185 | 0,38441 | 0,77796 | 0,35538 |
| 6-311G(d) | 0,00310 | 0,01442 | 0,01967 | 0,03981 | 0,01819 |
| 6-311G(dp) | 0,00147 | 0,00683 | 0,00932 | 0,01886 | 0,00861 |
| 6-311++G(dp) | 0,00002 | 0,00008 | 0,00010 | 0,00021 | 0,00010 |
| cc-pVDZ | 0,04014 | 0,18705 | 0,25511 | 0,51630 | 0,23585 |
| cc-pVDZ - scale | 0,04247 | 0,19787 | 0,26987 | 0,54617 | 0,24949 |
| cc-pVTZ | 0,00012 | 0,00057 | 0,00078 | 0,00158 | 0,00072 |
| cc-pVTZ - scale | 0,00014 | 0,00064 | 0,00087 | 0,00175 | 0,00080 |

8.2.4 Geometrien der Moleküle

Es sind für alle berechneten Moleküle nur die Molekülgeometrien des Konformers mit der geringsten Energie dargestellt.

8.2.4.1 B3LYP 6-31G(d)

8.2.4.1.1 Aldehyde

Formaldehyd

```
C
O,  1,  oc2
H,  1,  hc3,  2,  hco3
H,  1,  hc4,  2,  hco4,  3,  dih4,  0
```

Variablen:

```
oc2=1.20648198
hc3=1.11042823
hco3=122.37961463
hc4=1.11042823
hco4=122.37961463
dih4=180
```

Acetaldehyd

```
C
C,  1,  R2
H,  1,  R3,  2,  A3
H,  1,  R4,  2,  A4,  3,  D4,  0
H,  1,  R4,  2,  A4,  3,  -D4,  0
O,  2,  R6,  1,  A6,  3,  0.,  0
H,  2,  R7,  1,  A7,  3,  180.,  0
```

Variables:

```
R2=1.50828026
R3=1.09233268
R4=1.09805587
R6=1.21055758
R7=1.11424064
A3=110.49876813
A4=109.80937947
A6=124.70820227
A7=114.79427027
D4=-121.50114415
```

Propanal

C

| | | | | | | | |
|----|----|-------|----|--------|----|--------|---|
| C, | 1, | cc2 | | | | | |
| H, | 2, | hc3, | 1, | hcc3 | | | |
| H, | 2, | hc4, | 1, | hcc4, | 3, | dih4, | 0 |
| H, | 2, | hc5, | 1, | hcc5, | 3, | dih5, | 0 |
| C, | 1, | cc6, | 2, | ccc6, | 3, | dih6, | 0 |
| H, | 1, | hc7, | 2, | hcc7, | 6, | dih7, | 0 |
| H, | 1, | hc8, | 2, | hcc8, | 6, | dih8, | 0 |
| O, | 6, | oc9, | 1, | occ9, | 2, | dih9, | 0 |
| H, | 6, | hc10, | 9, | hco10, | 1, | dih10, | 0 |

Variablen:

cc2=1.52677117

hc3=1.0945957

hcc3=110.80572032

hc4=1.09416271

hcc4=110.87382242

dih4=120.45605394

hc5=1.09416271

hcc5=110.87382242

dih5=-120.45605394

cc6=1.51201062

ccc6=113.93481711

dih6=180.

hc7=1.10142796

hcc7=111.68791513

dih7=121.56312296

hc8=1.10142796

hcc8=111.68791513

dih8=-121.56312296

oc9=1.21135112

occ9=124.75784976

dih9=0.

hc10=1.11457202

hco10=120.46891746

dih10=180.

Butanal

C

| | | | | | | | |
|----|----|------|----|-------|----|-------|---|
| C, | 1, | cc2 | | | | | |
| H, | 2, | hc3, | 1, | hcc3 | | | |
| H, | 2, | hc4, | 1, | hcc4, | 3, | dih4, | 0 |
| H, | 2, | hc5, | 1, | hcc5, | 3, | dih5, | 0 |
| H, | 1, | hc6, | 2, | hcc6, | 3, | dih6, | 0 |
| C, | 1, | cc7, | 2, | ccc7, | 6, | dih7, | 0 |

| | | | | | | | |
|----|----|-------|-----|--------|----|--------|---|
| H, | 1, | hc8, | 2, | hcc8, | 6, | dih8, | 0 |
| C, | 7, | cc9, | 1, | ccc9, | 2, | dih9, | 0 |
| H, | 7, | hc10, | 1, | hcc10, | 9, | dih10, | 0 |
| H, | 7, | hc11, | 1, | hcc11, | 9, | dih11, | 0 |
| O, | 9, | oc12, | 7, | occ12, | 1, | dih12, | 0 |
| H, | 9, | hc13, | 12, | hco13, | 7, | dih13, | 0 |

Variablen:

cc2=1.53131324
hc3=1.09713915
hcc3=111.41907026
hc4=1.09713915
hcc4=111.41908475
dih4=120.0789534
hc5=1.0955636
hcc5=111.05963259
dih5=-119.96051836
hc6=1.09646923
hcc6=110.13307255
dih6=178.06258549
cc7=1.52928877
ccc7=112.78069423
dih7=121.89782568
hc8=1.09646904
hcc8=110.13310992
dih8=-116.20438694
cc9=1.51155032
ccc9=114.41125013
dih9=179.99962308
hc10=1.10239927
hcc10=111.39288672
dih10=121.82521879
hc11=1.1023995
hcc11=111.39283867
dih11=-121.82537153
oc12=1.21159572
occ12=124.84834961
dih12=-0.00147819
hc13=1.11470566
hco13=120.39990218
dih13=-179.99990438

Heptanal

C

| | | | | | | | |
|----|-----|-------|-----|--------|-----|--------|---|
| C, | 1, | cc2 | | | | | |
| H, | 2, | hc3, | 1, | hcc3 | | | |
| H, | 2, | hc4, | 1, | hcc4, | 3, | dih4, | 0 |
| H, | 2, | hc5, | 1, | hcc5, | 3, | dih5, | 0 |
| C, | 1, | cc6, | 2, | ccc6, | 3, | dih6, | 0 |
| H, | 1, | hc7, | 2, | hcc7, | 6, | dih7, | 0 |
| H, | 1, | hc8, | 2, | hcc8, | 6, | dih8, | 0 |
| C, | 6, | cc9, | 1, | ccc9, | 2, | dih9, | 0 |
| H, | 6, | hc10, | 1, | hcc10, | 9, | dih10, | 0 |
| H, | 6, | hc11, | 1, | hcc11, | 9, | dih11, | 0 |
| C, | 9, | cc12, | 6, | ccc12, | 1, | dih12, | 0 |
| H, | 9, | hc13, | 6, | hcc13, | 12, | dih13, | 0 |
| H, | 9, | hc14, | 6, | hcc14, | 12, | dih14, | 0 |
| C, | 12, | cc15, | 9, | ccc15, | 6, | dih15, | 0 |
| H, | 12, | hc16, | 9, | hcc16, | 15, | dih16, | 0 |
| H, | 12, | hc17, | 9, | hcc17, | 15, | dih17, | 0 |
| C, | 15, | cc18, | 12, | ccc18, | 9, | dih18, | 0 |
| H, | 15, | hc19, | 12, | hcc19, | 18, | dih19, | 0 |
| H, | 15, | hc20, | 12, | hcc20, | 18, | dih20, | 0 |
| O, | 18, | oc21, | 15, | occ21, | 12, | dih21, | 0 |
| H, | 18, | hc22, | 21, | hco22, | 15, | dih22, | 0 |

Variablen:

cc2=1.53208293

hc3=1.09599001

hcc3=111.43692372

hc4=1.09698848

hcc4=111.18202867

dih4=120.13805999

hc5=1.09698848

hcc5=111.18202843

dih5=-120.13806003

cc6=1.53405025

ccc6=113.21079956

dih6=180.

hc7=1.09942007

hcc7=109.45302016

dih7=122.10457381

hc8=1.09942007

hcc8=109.45301969

dih8=-122.10457345

cc9=1.53401901

ccc9=113.55141634

dih9=180.


```

hc10=1.10009788
hcc10=109.26054675
dih10=122.2455634
hc11=1.10009788
hcc11=109.26054675
dih11=-122.24556281
cc12=1.53352734
ccc12=113.23523396
dih12=180.
hc13=1.10045472
hcc13=109.23074546
dih13=122.27104977
hc14=1.10045472
hcc14=109.2307454
dih14=-122.27104901
cc15=1.52912165
ccc15=113.07126507
dih15=180.
hc16=1.09735073
hcc16=109.94447364
dih16=122.03161646
hc17=1.09735073
hcc17=109.94447309
dih17=-122.03161538
cc18=1.51156007
ccc18=114.42946295
dih18=180.
hc19=1.10232568
hcc19=111.43609967
dih19=121.80480787
hc20=1.10232569
hcc20=111.43609748
dih20=-121.8048012
oc21=1.21157638
occ21=124.89390914
dih21=0.
hc22=1.11476035
hco22=120.39092635
dih22=180.

```

3-Phenylpropanal

```

C
C,  1,  cc2
C,  1,  cc3,  2,  ccc3
C,  3,  cc4,  1,  ccc4,  2,  dih4,  0
C,  4,  cc5,  3,  ccc5,  1,  dih5,  0

```

| | | | | | | | |
|----|-----|-------|-----|--------|-----|--------|---|
| C, | 5, | cc6, | 4, | ccc6, | 3, | dih6, | 0 |
| C, | 6, | cc7, | 5, | ccc7, | 4, | dih7, | 0 |
| H, | 3, | hc8, | 1, | hcc8, | 4, | dih8, | 0 |
| H, | 4, | hc9, | 3, | hcc9, | 5, | dih9, | 0 |
| H, | 5, | hc10, | 4, | hcc10, | 6, | dih10, | 0 |
| H, | 6, | hc11, | 5, | hcc11, | 4, | dih11, | 0 |
| H, | 7, | hc12, | 6, | hcc12, | 5, | dih12, | 0 |
| H, | 2, | hc13, | 1, | hcc13, | 3, | dih13, | 0 |
| H, | 2, | hc14, | 1, | hcc14, | 13, | dih14, | 0 |
| C, | 2, | cc15, | 1, | ccc15, | 13, | dih15, | 0 |
| C, | 15, | cc16, | 2, | ccc16, | 1, | dih16, | 0 |
| H, | 15, | hc17, | 2, | hcc17, | 16, | dih17, | 0 |
| H, | 15, | hc18, | 2, | hcc18, | 16, | dih18, | 0 |
| O, | 16, | oc19, | 15, | occ19, | 2, | dih19, | 0 |
| H, | 16, | hc20, | 19, | hco20, | 15, | dih20, | 0 |

Variablen:

cc2=1.51371937
cc3=1.4015169
ccc3=120.84768773
cc4=1.39547727
ccc4=120.97659261
dih4=-178.32895533
cc5=1.39600508
ccc5=120.11617053
dih5=-0.04248308
cc6=1.39600515
ccc6=119.52636386
dih6=-0.1089843
cc7=1.39547713
ccc7=120.11617653
dih7=0.10898884
hc8=1.08828528
hcc8=119.359455
dih8=-179.55789441
hc9=1.08701753
hcc9=119.78286985
dih9=-179.6472245
hc10=1.08670746
hcc10=120.23636185
dih10=-179.65254593
hc11=1.08701752
hcc11=120.1000178
dih11=-179.53707858
hc12=1.0882853
hcc12=119.66250293
dih12=-179.51406195

```

hc13=1.09572779
hcc13=110.37054055
dih13=-149.21690569
hc14=1.09572769
hcc14=110.37044613
dih14=116.91652051
cc15=1.53639834
ccc15=112.46868755
dih15=-121.54177793
cc16=1.51128489
ccc16=113.96720494
dih16=-179.99981238
hc17=1.10116133
hcc17=111.19293585
dih17=121.90738213
hc18=1.10116134
hcc18=111.19296426
dih18=-121.90742664
oc19=1.21158388
occ19=124.79246059
dih19=0.
hc20=1.11443182
hco20=120.4767331
dih20=180.

```

2-Chlorbenzaldehyd

```

C
C,  1,  cc2
C,  2,  cc3,  1,  ccc3
C,  3,  cc4,  2,  ccc4,  1,  dih4,  0
C,  4,  cc5,  3,  ccc5,  2,  dih5,  0
C,  5,  cc6,  4,  ccc6,  3,  dih6,  0
C,  6,  cc7,  5,  ccc7,  4,  dih7,  0
Cl, 3,  clc8,  2,  clcc8,  4,  dih8,  0
H,  4,  hc9,  3,  hcc9,  5,  dih9,  0
H,  5,  hc10, 4,  hcc10, 6,  dih10, 0
H,  6,  hc11, 5,  hcc11, 4,  dih11, 0
H,  7,  hc12, 6,  hcc12, 5,  dih12, 0
O,  1,  oc13, 2,  occ13, 3,  dih13, 0
H,  1,  hc14, 13, hco14, 2,  dih14, 0

```

Variablen:

```

cc2=1.48758075
cc3=1.40409596
ccc3=123.72554616
cc4=1.39418774

```

```

ccc4=121.19722509
dih4=180.
cc5=1.39456346
ccc5=119.42553938
dih5=0.
cc6=1.39834548
ccc6=120.46361719
dih6=0.
cc7=1.38874692
ccc7=119.51767827
dih7=0.
clc8=1.76258147
clcc8=121.23257512
dih8=180.
hc9=1.08466208
hcc9=119.65909572
dih9=180.
hc10=1.08645055
hcc10=119.27188777
dih10=180.
hc11=1.08588068
hcc11=120.24919146
dih11=180.
hc12=1.08570675
hcc12=121.6137819
dih12=180.
oc13=1.21691918
occ13=123.08946484
dih13=180.
hc14=1.10486706
hco14=120.8241057
dih14=180.

```

8.2.4.1.2 Alkohole

Methanol

```

C
O,  1,  oc2
H,  1,  hc3,  2,  hco3
H,  1,  hc4,  2,  hco4,  3,  dih4,  0
H,  1,  hc5,  2,  hco5,  3,  dih5,  0
H,  2,  ho6,  1,  hoc6,  3,  dih6,  0

```

Variablen:

```

oc2=1.41863728
hc3=1.10127536

```

```

hco3=112.70566355
hc4=1.09341689
hco4=106.69447918
dih4=118.45701451
hc5=1.10127536
hco5=112.70566355
dih5=-123.08597097
ho6=0.96869567
hoc6=107.65906473
dih6=61.54298549

```

Ethanol

```

C
C,  1,  cc2
H,  1,  hc3,  2,  hcc3
H,  1,  hc4,  2,  hcc4,  3,  dih4,  0
H,  1,  hc5,  2,  hcc5,  3,  dih5,  0
H,  2,  hc6,  1,  hcc6,  3,  dih6,  0
O,  2,  oc7,  1,  occ7,  6,  dih7,  0
H,  2,  hc8,  1,  hcc8,  6,  dih8,  0
H,  7,  ho9,  2,  hoc9,  1,  dih9,  0

```

Variablen:

```

cc2=1.52632939
hc3=1.09810743
hcc3=111.04108788
hc4=1.09501947
hcc4=110.44906769
dih4=119.86799813
hc5=1.09669856
hcc5=111.01933175
dih5=-119.62663549
hc6=1.09497308
hcc6=110.24074292
dih6=179.30767632
oc7=1.42388433
occ7=112.85366834
dih7=117.33557591
hc8=1.10257123
hcc8=110.16145483
dih8=-117.9158632
ho9=0.96991837
hoc9=107.39069044
dih9=61.82606683

```

1-Propanol

C

| | | | | | | | |
|----|----|-------|----|--------|----|--------|---|
| C, | 1, | cc2 | | | | | |
| H, | 1, | hc3, | 2, | hcc3 | | | |
| H, | 1, | hc4, | 2, | hcc4, | 3, | dih4, | 0 |
| H, | 1, | hc5, | 2, | hcc5, | 3, | dih5, | 0 |
| H, | 2, | hc6, | 1, | hcc6, | 3, | dih6, | 0 |
| C, | 2, | cc7, | 1, | ccc7, | 6, | dih7, | 0 |
| H, | 2, | hc8, | 1, | hcc8, | 6, | dih8, | 0 |
| O, | 7, | oc9, | 2, | occ9, | 1, | dih9, | 0 |
| H, | 7, | hc10, | 2, | hcc10, | 9, | dih10, | 0 |
| H, | 7, | hc11, | 2, | hcc11, | 9, | dih11, | 0 |
| H, | 9, | ho12, | 7, | hoc12, | 2, | dih12, | 0 |

Variablen:

```

cc2=1.53102935
hc3=1.09696721
hcc3=110.92452853
hc4=1.09439751
hcc4=110.5937596
dih4=119.24724977
hc5=1.09558728
hcc5=111.41127969
dih5=-120.1287296
hc6=1.10113864
hcc6=109.84800125
dih6=175.29291698
cc7=1.53094081
ccc7=113.18188551
dih7=121.83997125
hc8=1.09911768
hcc8=110.36291555
dih8=-116.46328274
oc9=1.42524805
occ9=113.24571844
dih9=-59.04609906
hc10=1.0960057
hcc10=110.07251233
dih10=117.35835573
hc11=1.10237854
hcc11=109.97875398
dih11=-124.70065127
ho12=0.9701912
hoc12=107.32666779
dih12=-62.82511782

```

8.2.4.1.3 Halbacetale

Methoxyethanol

C

| | | | | | | | |
|----|----|-------|----|--------|-----|--------|---|
| O, | 1, | oc2 | | | | | |
| C, | 2, | co3, | 1, | coc3 | | | |
| H, | 3, | hc4, | 2, | hco4, | 1, | dih4, | 0 |
| H, | 3, | hc5, | 2, | hco5, | 4, | dih5, | 0 |
| H, | 3, | hc6, | 2, | hco6, | 4, | dih6, | 0 |
| C, | 1, | cc7, | 2, | cco7, | 3, | dih7, | 0 |
| O, | 1, | oc8, | 2, | oco8, | 7, | dih8, | 0 |
| H, | 1, | hc9, | 2, | hco9, | 7, | dih9, | 0 |
| H, | 8, | ho10, | 1, | hoc10, | 2, | dih10, | 0 |
| H, | 7, | hc11, | 1, | hcc11, | 2, | dih11, | 0 |
| H, | 7, | hc12, | 1, | hcc12, | 11, | dih12, | 0 |
| H, | 7, | hc13, | 1, | hcc13, | 11, | dih13, | 0 |

Variablen:

oc2=1.40907256
co3=1.4204243
coc3=113.7892488
hc4=1.09273877
hco4=106.7515618
dih4=-179.97690366
hc5=1.1010657
hco5=111.19531358
dih5=118.78656559
hc6=1.09637545
hco6=111.62383062
dih6=-119.74763521
cc7=1.52097866
cco7=106.9661804
dih7=171.96865249
oc8=1.4151236
oco8=112.14779949
dih8=123.69662514
hc9=1.10016204
hco9=110.16479874
dih9=-121.02936129
ho10=0.97246969
hoc10=106.63064245
dih10=-62.53543971
hc11=1.09362156
hcc11=110.05409174
dih11=179.01400067
hc12=1.09407316
hcc12=110.72802409

dih12=120.87837172
 hc13=1.09684022
 hcc13=109.85062938
 dih13=-119.94935572

Ethoxyethanol

C
 O, 1, oc2
 C, 2, co3, 1, coc3
 C, 3, cc4, 2, cco4, 1, dih4, 0
 H, 3, hc5, 2, hco5, 4, dih5, 0
 H, 3, hc6, 2, hco6, 4, dih6, 0
 C, 1, cc7, 2, cco7, 3, dih7, 0
 O, 1, oc8, 2, oco8, 7, dih8, 0
 H, 1, hc9, 2, hco9, 7, dih9, 0
 H, 8, ho10, 1, hoc10, 2, dih10, 0
 H, 7, hc11, 1, hcc11, 2, dih11, 0
 H, 7, hc12, 1, hcc12, 11, dih12, 0
 H, 7, hc13, 1, hcc13, 11, dih13, 0
 H, 4, hc14, 3, hcc14, 2, dih14, 0
 H, 4, hc15, 3, hcc15, 14, dih15, 0
 H, 4, hc16, 3, hcc16, 14, dih16, 0

Variablen:

oc2=1.40826109
 co3=1.42785814
 coc3=114.31114316
 cc4=1.51946045
 cco4=108.14799556
 dih4=179.77519675
 hc5=1.10253464
 hco5=109.51359082
 dih5=120.72345156
 hc6=1.09758435
 hco6=109.96414113
 dih6=-121.48937066
 cc7=1.52138206
 cco7=107.03633626
 dih7=171.00154067
 oc8=1.41593951
 oco8=112.18243528
 dih8=123.65617674
 hc9=1.09993616
 hco9=110.22631094
 dih9=-121.03372443
 ho10=0.97243094

hoc10=106.57841929
 dih10=-61.85645274
 hc11=1.09365617
 hcc11=110.06851947
 dih11=178.86713793
 hc12=1.09413144
 hcc12=110.73303254
 dih12=120.88903474
 hc13=1.0968486
 hcc13=109.85494985
 dih13=-119.94138529
 hc14=1.09567224
 hcc14=110.36065424
 dih14=179.58756197
 hc15=1.09504259
 hcc15=110.59629499
 dih15=119.96338703
 hc16=1.09492016
 hcc16=110.70724517
 dih16=-120.16744875

Propoxyethanol

| | | | | | | | |
|----|-----|-------|----|--------|-----|--------|---|
| C | | | | | | | |
| O, | 1, | oc2 | | | | | |
| C, | 2, | co3, | 1, | coc3 | | | |
| C, | 3, | cc4, | 2, | cco4, | 1, | dih4, | 0 |
| H, | 3, | hc5, | 2, | hco5, | 4, | dih5, | 0 |
| H, | 3, | hc6, | 2, | hco6, | 4, | dih6, | 0 |
| C, | 1, | cc7, | 2, | cco7, | 3, | dih7, | 0 |
| O, | 1, | oc8, | 2, | oco8, | 7, | dih8, | 0 |
| H, | 1, | hc9, | 2, | hco9, | 7, | dih9, | 0 |
| H, | 8, | ho10, | 1, | hoc10, | 2, | dih10, | 0 |
| H, | 7, | hc11, | 1, | hcc11, | 2, | dih11, | 0 |
| H, | 7, | hc12, | 1, | hcc12, | 11, | dih12, | 0 |
| H, | 7, | hc13, | 1, | hcc13, | 11, | dih13, | 0 |
| C, | 4, | cc14, | 3, | ccc14, | 2, | dih14, | 0 |
| H, | 4, | hc15, | 3, | hcc15, | 14, | dih15, | 0 |
| H, | 4, | hc16, | 3, | hcc16, | 14, | dih16, | 0 |
| H, | 14, | hc17, | 4, | hcc17, | 3, | dih17, | 0 |
| H, | 14, | hc18, | 4, | hcc18, | 17, | dih18, | 0 |
| H, | 14, | hc19, | 4, | hcc19, | 17, | dih19, | 0 |

Variablen:

oc2=1.40814412
 co3=1.42822708
 coc3=114.44162614

cc4=1.52387603
cco4=108.57816924
dih4=-178.1800809
hc5=1.10351298
hco5=109.45069244
dih5=120.64157533
hc6=1.09763475
hco6=109.91261436
dih6=-121.4927812
cc7=1.5213955
cco7=107.07188954
dih7=171.2500436
oc8=1.41571057
oco8=112.14761062
dih8=123.6671525
hc9=1.0998306
hco9=110.17913181
dih9=-121.05579582
ho10=0.97243662
hoc10=106.61161676
dih10=-62.0267535
hc11=1.09365302
hcc11=110.05918311
dih11=178.91446836
hc12=1.09414641
hcc12=110.74278174
dih12=120.86589967
hc13=1.09685238
hcc13=109.86703421
dih13=-119.93384476
cc14=1.53161736
ccc14=113.48946716
dih14=62.4111555
hc15=1.09837772
hcc15=107.86888112
dih15=122.36184186
hc16=1.09773146
hcc16=108.46253852
dih16=-122.49236792
hc17=1.09569441
hcc17=111.17276685
dih17=-179.2912863
hc18=1.0940911
hcc18=110.69418057
dih18=120.33825101
hc19=1.09732714

hcc19=111.0479589
dih19=-119.94263062

1-Methoxy-1-Propanol

C
O, 1, oc2
C, 2, co3, 1, coc3
H, 3, hc4, 2, hco4, 1, dih4, 0
H, 3, hc5, 2, hco5, 4, dih5, 0
H, 3, hc6, 2, hco6, 4, dih6, 0
C, 1, cc7, 2, cco7, 3, dih7, 0
O, 1, oc8, 2, oco8, 7, dih8, 0
H, 1, hc9, 2, hco9, 7, dih9, 0
H, 8, ho10, 1, hoc10, 2, dih10, 0
C, 7, cc11, 1, ccc11, 2, dih11, 0
H, 7, hc12, 1, hcc12, 11, dih12, 0
H, 7, hc13, 1, hcc13, 11, dih13, 0
H, 11, hc14, 7, hcc14, 1, dih14, 0
H, 11, hc15, 7, hcc15, 14, dih15, 0
H, 11, hc16, 7, hcc16, 14, dih16, 0

Variablen:

oc2=1.40917337
co3=1.42029479
coc3=113.9228619
hc4=1.09278274
hco4=106.78205767
dih4=-179.94937356
hc5=1.10090562
hco5=111.18384251
dih5=118.81858421
hc6=1.0963729
hco6=111.56373381
dih6=-119.7189806
cc7=1.52645323
cco7=107.38390922
dih7=171.18469154
oc8=1.41487547
oco8=111.97011489
dih8=123.69537939
hc9=1.10090609
hco9=110.13099003
dih9=-120.950132
ho10=0.97241832
hoc10=106.61039173
dih10=-62.90561189

cc11=1.53094705
 ccc11=113.69233677
 dih11=-62.19510986
 hc12=1.09968613
 hcc12=107.75557508
 dih12=122.07573514
 hc13=1.09620418
 hcc13=107.38525579
 dih13=-122.82042447
 hc14=1.09538512
 hcc14=110.92522921
 dih14=-179.60798029
 hc15=1.09706968
 hcc15=111.10108509
 dih15=119.64326048
 hc16=1.09362008
 hcc16=110.75494461
 dih16=-120.42598369

1-Ethoxy-1-Propanol

C
 O, 1, oc2
 C, 2, co3, 1, coc3
 C, 3, cc4, 2, cco4, 1, dih4, 0
 H, 3, hc5, 2, hco5, 4, dih5, 0
 H, 3, hc6, 2, hco6, 4, dih6, 0
 C, 1, cc7, 2, cco7, 3, dih7, 0
 O, 1, oc8, 2, oco8, 7, dih8, 0
 H, 1, hc9, 2, hco9, 7, dih9, 0
 H, 8, ho10, 1, hoc10, 2, dih10, 0
 C, 7, cc11, 1, ccc11, 2, dih11, 0
 H, 7, hc12, 1, hcc12, 11, dih12, 0
 H, 7, hc13, 1, hcc13, 11, dih13, 0
 H, 11, hc14, 7, hcc14, 1, dih14, 0
 H, 11, hc15, 7, hcc15, 14, dih15, 0
 H, 11, hc16, 7, hcc16, 14, dih16, 0
 H, 4, hc17, 3, hcc17, 2, dih17, 0
 H, 4, hc18, 3, hcc18, 17, dih18, 0
 H, 4, hc19, 3, hcc19, 17, dih19, 0

Variablen:

oc2=1.40837417
 co3=1.4277543
 coc3=114.45539084
 cc4=1.51941651
 cco4=108.1812321

dih4=179.89104472
hc5=1.10235098
hco5=109.50561057
dih5=120.75635447
hc6=1.09757872
hco6=109.89874138
dih6=-121.45801607
cc7=1.52686977
cco7=107.44581857
dih7=170.22188015
oc8=1.41564977
oco8=112.00848838
dih8=123.6570409
hc9=1.10067845
hco9=110.1895508
dih9=-120.9486387
ho10=0.97237014
hoc10=106.56110225
dih10=-62.24990075
cc11=1.53091189
ccc11=113.67876242
dih11=-62.21943561
hc12=1.09968833
hcc12=107.76531471
dih12=122.06288101
hc13=1.09621406
hcc13=107.40546493
dih13=-122.83050579
hc14=1.09539319
hcc14=110.94810807
dih14=-179.69853097
hc15=1.09709453
hcc15=111.10391838
dih15=119.65790317
hc16=1.0936434
hcc16=110.7302574
dih16=-120.42711519
hc17=1.09566818
hcc17=110.35521958
dih17=179.63804533
hc18=1.09503315
hcc18=110.60313803
dih18=119.96092591
hc19=1.09496382
hcc19=110.71304251

dih19=-120.14818385

1-Propoxy-1-Propanol

C

| | | | | | | | |
|----|-----|-------|----|--------|-----|--------|---|
| O, | 1, | oc2 | | | | | |
| C, | 2, | co3, | 1, | coc3 | | | |
| C, | 3, | cc4, | 2, | cco4, | 1, | dih4, | 0 |
| H, | 3, | hc5, | 2, | hco5, | 4, | dih5, | 0 |
| H, | 3, | hc6, | 2, | hco6, | 4, | dih6, | 0 |
| C, | 1, | cc7, | 2, | cco7, | 3, | dih7, | 0 |
| O, | 1, | oc8, | 2, | oco8, | 7, | dih8, | 0 |
| H, | 1, | hc9, | 2, | hco9, | 7, | dih9, | 0 |
| H, | 8, | ho10, | 1, | hoc10, | 2, | dih10, | 0 |
| C, | 7, | cc11, | 1, | ccc11, | 2, | dih11, | 0 |
| H, | 7, | hc12, | 1, | hcc12, | 11, | dih12, | 0 |
| H, | 7, | hc13, | 1, | hcc13, | 11, | dih13, | 0 |
| H, | 11, | hc14, | 7, | hcc14, | 1, | dih14, | 0 |
| H, | 11, | hc15, | 7, | hcc15, | 14, | dih15, | 0 |
| H, | 11, | hc16, | 7, | hcc16, | 14, | dih16, | 0 |
| C, | 4, | cc17, | 3, | ccc17, | 2, | dih17, | 0 |
| H, | 4, | hc18, | 3, | hcc18, | 17, | dih18, | 0 |
| H, | 4, | hc19, | 3, | hcc19, | 17, | dih19, | 0 |
| H, | 17, | hc20, | 4, | hcc20, | 3, | dih20, | 0 |
| H, | 17, | hc21, | 4, | hcc21, | 20, | dih21, | 0 |
| H, | 17, | hc22, | 4, | hcc22, | 20, | dih22, | 0 |

Variablen:

oc2=1.40865936
 co3=1.42831711
 coc3=114.56468761
 cc4=1.5238942
 cco4=108.60134126
 dih4=176.96789789
 hc5=1.10228067
 hco5=109.41574766
 dih5=120.73484307
 hc6=1.09851339
 hco6=109.79227023
 dih6=-121.29958493
 cc7=1.52685361
 cco7=107.43953629
 dih7=169.91107786
 oc8=1.41521353
 oco8=111.99492625
 dih8=123.67061227
 hc9=1.10058442

hco9=110.16038125
dih9=-120.92021627
ho10=0.97237623
hoc10=106.566609
dih10=-61.87602014
cc11=1.53091513
ccc11=113.67726204
dih11=-62.28712352
hc12=1.09970624
hcc12=107.76449464
dih12=122.07731804
hc13=1.0962013
hcc13=107.40418487
dih13=-122.82798261
hc14=1.09538154
hcc14=110.94944189
dih14=-179.71400771
hc15=1.0970849
hcc15=111.10118712
dih15=119.65685346
hc16=1.09365606
hcc16=110.73683232
dih16=-120.43108702
cc17=1.53180915
ccc17=113.33419215
dih17=-63.35048911
hc18=1.09760441
hcc18=108.59837945
dih18=122.4933114
hc19=1.09835583
hcc19=107.88654562
dih19=-122.18453527
hc20=1.09562304
hcc20=111.18392326
dih20=179.46231946
hc21=1.09732492
hcc21=111.04957619
dih21=119.95970301
hc22=1.09422682
hcc22=110.66917769
dih22=-120.25958322

1-Methoxy-1-Butanol

C

O, 1, oc2

C, 2, co3, 1, coc3

| | | | | | | | |
|----|-----|-------|-----|--------|-----|--------|---|
| H, | 3, | hc4, | 2, | hco4, | 1, | dih4, | 0 |
| H, | 3, | hc5, | 2, | hco5, | 4, | dih5, | 0 |
| H, | 3, | hc6, | 2, | hco6, | 4, | dih6, | 0 |
| C, | 1, | cc7, | 2, | cco7, | 3, | dih7, | 0 |
| O, | 1, | oc8, | 2, | oco8, | 7, | dih8, | 0 |
| H, | 1, | hc9, | 2, | hco9, | 7, | dih9, | 0 |
| H, | 8, | ho10, | 1, | hoc10, | 2, | dih10, | 0 |
| C, | 7, | cc11, | 1, | ccc11, | 2, | dih11, | 0 |
| H, | 7, | hc12, | 1, | hcc12, | 11, | dih12, | 0 |
| H, | 7, | hc13, | 1, | hcc13, | 11, | dih13, | 0 |
| C, | 11, | cc14, | 7, | ccc14, | 1, | dih14, | 0 |
| H, | 11, | hc15, | 7, | hcc15, | 14, | dih15, | 0 |
| H, | 11, | hc16, | 7, | hcc16, | 14, | dih16, | 0 |
| H, | 14, | hc17, | 11, | hcc17, | 7, | dih17, | 0 |
| H, | 14, | hc18, | 11, | hcc18, | 17, | dih18, | 0 |
| H, | 14, | hc19, | 11, | hcc19, | 17, | dih19, | 0 |

Variablen:

oc2=1.40946096
 co3=1.42033035
 coc3=113.91206937
 hc4=1.09278149
 hco4=106.77589227
 dih4=-179.82531015
 hc5=1.10091538
 hco5=111.18534009
 dih5=118.81730961
 hc6=1.09634026
 hco6=111.56510894
 dih6=-119.72106417
 cc7=1.52610553
 cco7=107.40808799
 dih7=171.33837754
 oc8=1.41513794
 oco8=111.9488038
 dih8=123.71602332
 hc9=1.10079421
 hco9=110.10074179
 dih9=-121.02391786
 ho10=0.97239519
 hoc10=106.61185713
 dih10=-63.30179987
 cc11=1.53334816
 ccc11=114.0946043
 dih11=-62.50244077
 hc12=1.10058174
 hcc12=107.87945857

dih12=122.12134476
 hc13=1.09720628
 hcc13=107.47479618
 dih13=-122.75402709
 cc14=1.53187116
 ccc14=112.79026612
 dih14=-179.3549508
 hc15=1.09950677
 hcc15=109.13900318
 dih15=121.81559302
 hc16=1.09567787
 hcc16=108.86938798
 dih16=-122.4653226
 hc17=1.09586706
 hcc17=111.25798441
 dih17=179.9105796
 hc18=1.09703907
 hcc18=111.18607743
 dih18=119.96186926
 hc19=1.0971084
 hcc19=111.36419597
 dih19=-120.14219492

1-Ethoxy-1-Butanol

C
 O, 1, oc2
 C, 2, co3, 1, coc3
 C, 3, cc4, 2, cco4, 1, dih4, 0
 H, 3, hc5, 2, hco5, 4, dih5, 0
 H, 3, hc6, 2, hco6, 4, dih6, 0
 C, 1, cc7, 2, cco7, 3, dih7, 0
 O, 1, oc8, 2, oco8, 7, dih8, 0
 H, 1, hc9, 2, hco9, 7, dih9, 0
 H, 8, ho10, 1, hoc10, 2, dih10, 0
 C, 7, cc11, 1, ccc11, 2, dih11, 0
 H, 7, hc12, 1, hcc12, 11, dih12, 0
 H, 7, hc13, 1, hcc13, 11, dih13, 0
 C, 11, cc14, 7, ccc14, 1, dih14, 0
 H, 11, hc15, 7, hcc15, 14, dih15, 0
 H, 11, hc16, 7, hcc16, 14, dih16, 0
 H, 14, hc17, 11, hcc17, 7, dih17, 0
 H, 14, hc18, 11, hcc18, 17, dih18, 0
 H, 14, hc19, 11, hcc19, 17, dih19, 0
 H, 4, hc20, 3, hcc20, 2, dih20, 0
 H, 4, hc21, 3, hcc21, 20, dih21, 0
 H, 4, hc22, 3, hcc22, 20, dih22, 0

Variablen:

oc2=1.40866236
co3=1.42777201
coc3=114.4443721
cc4=1.51941994
cco4=108.17880445
dih4=-179.95518455
hc5=1.1023599
hco5=109.50849948
dih5=120.75826396
hc6=1.09754536
hco6=109.8991258
dih6=-121.45904479
cc7=1.52651986
cco7=107.47234503
dih7=170.39743998
oc8=1.41592259
oco8=111.98738338
dih8=123.67723038
hc9=1.10057188
hco9=110.16027508
dih9=-121.0232795
ho10=0.9723514
hoc10=106.56359602
dih10=-62.65239187
cc11=1.53330892
ccc11=114.08390839
dih11=-62.51886921
hc12=1.10058158
hcc12=107.89146283
dih12=122.10863137
hc13=1.09721315
hcc13=107.4906214
dih13=-122.76521315
cc14=1.53185236
ccc14=112.81067944
dih14=-179.40097846
hc15=1.09953105
hcc15=109.14065369
dih15=121.82323673
hc16=1.09570109
hcc16=108.84590463
dih16=-122.47140065
hc17=1.0958919
hcc17=111.2657922
dih17=179.91351192

```

hc18=1.09704629
hcc18=111.18911215
dih18=119.96916167
hc19=1.09710098
hcc19=111.35859335
dih19=-120.14103246
hc20=1.09567225
hcc20=110.35437635
dih20=179.65946737
hc21=1.09503502
hcc21=110.60211654
dih21=119.95814041
hc22=1.09496321
hcc22=110.71489409
dih22=-120.1508399

```

1-Propoxy-1-Butanol

```

C
O, 1, oc2
C, 2, co3, 1, coc3
C, 3, cc4, 2, cco4, 1, dih4, 0
H, 3, hc5, 2, hco5, 4, dih5, 0
H, 3, hc6, 2, hco6, 4, dih6, 0
C, 1, cc7, 2, cco7, 3, dih7, 0
O, 1, oc8, 2, oco8, 7, dih8, 0
H, 1, hc9, 2, hco9, 7, dih9, 0
H, 8, ho10, 1, hoc10, 2, dih10, 0
C, 7, cc11, 1, ccc11, 2, dih11, 0
H, 7, hc12, 1, hcc12, 11, dih12, 0
H, 7, hc13, 1, hcc13, 11, dih13, 0
C, 11, cc14, 7, ccc14, 1, dih14, 0
H, 11, hc15, 7, hcc15, 14, dih15, 0
H, 11, hc16, 7, hcc16, 14, dih16, 0
H, 14, hc17, 11, hcc17, 7, dih17, 0
H, 14, hc18, 11, hcc18, 17, dih18, 0
H, 14, hc19, 11, hcc19, 17, dih19, 0
C, 4, cc20, 3, ccc20, 2, dih20, 0
H, 4, hc21, 3, hcc21, 20, dih21, 0
H, 4, hc22, 3, hcc22, 20, dih22, 0
H, 20, hc23, 4, hcc23, 3, dih23, 0
H, 20, hc24, 4, hcc24, 23, dih24, 0
H, 20, hc25, 4, hcc25, 23, dih25, 0

```

Variablen:

```

oc2=1.40897665
co3=1.42834212

```

coc3=114.55231866
cc4=1.52389356
cco4=108.60005396
dih4=176.93680373
hc5=1.10228653
hco5=109.41829679
dih5=120.73827449
hc6=1.09847058
hco6=109.79059129
dih6=-121.29365807
cc7=1.52649288
cco7=107.45988825
dih7=170.05916089
oc8=1.4154776
oco8=111.97046057
dih8=123.68994443
hc9=1.10046856
hco9=110.13760442
dih9=-120.99190974
ho10=0.97235551
hoc10=106.56602863
dih10=-62.26574077
cc11=1.53332721
ccc11=114.07441645
dih11=-62.61310637
hc12=1.10060601
hcc12=107.88753922
dih12=122.11889292
hc13=1.09719545
hcc13=107.49511388
dih13=-122.7628031
cc14=1.53185032
ccc14=112.81628068
dih14=-179.44505061
hc15=1.09952604
hcc15=109.13871133
dih15=121.82312208
hc16=1.09571667
hcc16=108.85059804
dih16=-122.47578139
hc17=1.0958814
hcc17=111.26284415
dih17=179.91351052
hc18=1.09704305
hcc18=111.18907806
dih18=119.97070111

```

hc19=1.09709434
hcc19=111.35856249
dih19=-120.140454
cc20=1.53180631
ccc20=113.33072475
dih20=-63.35501635
hc21=1.0976041
hcc21=108.60219894
dih21=122.49453265
hc22=1.09835959
hcc22=107.88601958
dih22=-122.18082346
hc23=1.09562784
hcc23=111.18545942
dih23=179.46189173
hc24=1.0973258
hcc24=111.04999646
dih24=119.96055262
hc25=1.09422915
hcc25=110.66845888
dih25=-120.26256335

```

1-Methoxy-1-Heptanol

```

C
O, 1, oc2
C, 2, co3, 1, coc3
H, 3, hc4, 2, hco4, 1, dih4, 0
H, 3, hc5, 2, hco5, 4, dih5, 0
H, 3, hc6, 2, hco6, 4, dih6, 0
C, 1, cc7, 2, cco7, 3, dih7, 0
O, 1, oc8, 2, oco8, 7, dih8, 0
H, 1, hc9, 2, hco9, 7, dih9, 0
H, 8, ho10, 1, hoc10, 2, dih10, 0
C, 7, cc11, 1, ccc11, 2, dih11, 0
H, 7, hc12, 1, hcc12, 11, dih12, 0
H, 7, hc13, 1, hcc13, 11, dih13, 0
C, 11, cc14, 7, ccc14, 1, dih14, 0
H, 11, hc15, 7, hcc15, 14, dih15, 0
H, 11, hc16, 7, hcc16, 14, dih16, 0
C, 14, cc17, 11, ccc17, 7, dih17, 0
H, 14, hc18, 11, hcc18, 17, dih18, 0
H, 14, hc19, 11, hcc19, 17, dih19, 0
C, 17, cc20, 14, ccc20, 11, dih20, 0
H, 17, hc21, 14, hcc21, 20, dih21, 0
H, 17, hc22, 14, hcc22, 20, dih22, 0
C, 20, cc23, 17, ccc23, 14, dih23, 0

```

| | | | | | | | |
|----|-----|-------|-----|--------|-----|--------|---|
| H, | 20, | hc24, | 17, | hcc24, | 23, | dih24, | 0 |
| H, | 20, | hc25, | 17, | hcc25, | 23, | dih25, | 0 |
| H, | 23, | hc26, | 20, | hcc26, | 17, | dih26, | 0 |
| H, | 23, | hc27, | 20, | hcc27, | 26, | dih27, | 0 |
| H, | 23, | hc28, | 20, | hcc28, | 26, | dih28, | 0 |

Variablen:

oc2=1.40949273
co3=1.42029835
coc3=113.90599724
hc4=1.09278956
hco4=106.77877488
dih4=-179.9562297
hc5=1.10091847
hco5=111.18546942
dih5=118.81593216
hc6=1.0963451
hco6=111.56110508
dih6=-119.72135069
cc7=1.52617411
cco7=107.41845659
dih7=171.31126226
oc8=1.41524095
oco8=111.93187857
dih8=123.69915383
hc9=1.10076176
hco9=110.10786561
dih9=-121.04483386
ho10=0.97239375
hoc10=106.60216338
dih10=-63.32455563
cc11=1.53324934
ccc11=114.0697887
dih11=-62.6112665
hc12=1.10047466
hcc12=107.82870711
dih12=122.14977647
hc13=1.09710021
hcc13=107.42632536
dih13=-122.76741476
cc14=1.53399868
ccc14=113.10056086
dih14=-179.39326157
hc15=1.10036576
hcc15=109.1896652
dih15=121.8103752
hc16=1.09651829

```

hcc16=108.92524998
dih16=-122.46630034
cc17=1.53394641
ccc17=113.38877386
dih17=179.86116822
hc18=1.10027451
hcc18=109.2557438
dih18=122.0934401
hc19=1.10033834
hcc19=109.43790522
dih19=-122.27278549
cc20=1.53410886
ccc20=113.59586692
dih20=179.79668806
hc21=1.10036955
hcc21=109.29667828
dih21=122.22345725
hc22=1.10020186
hcc22=109.26506424
dih22=-122.24685599
cc23=1.53211773
ccc23=113.24580116
dih23=179.96793034
hc24=1.09938843
hcc24=109.21065852
dih24=122.23685925
hc25=1.09940668
hcc25=109.22057862
dih25=-122.24790192
hc26=1.09606016
hcc26=111.46253796
dih26=179.98576815
hc27=1.09707025
hcc27=111.18241369
dih27=120.14242159
hc28=1.09705252
hcc28=111.17903924
dih28=-120.14403922

```

1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol

```

C
C,  1,  cc2
C,  1,  cc3,  2,  ccc3
C,  3,  cc4,  1,  ccc4,  2,  dih4,  0
C,  4,  cc5,  3,  ccc5,  1,  dih5,  0
C,  5,  cc6,  4,  ccc6,  3,  dih6,  0

```

| | | | | | | | |
|-----|-----|-------|-----|--------|-----|--------|---|
| C, | 6, | cc7, | 5, | ccc7, | 4, | dih7, | 0 |
| Cl, | 3, | clc8, | 1, | clcc8, | 4, | dih8, | 0 |
| H, | 4, | hc9, | 3, | hcc9, | 5, | dih9, | 0 |
| H, | 5, | hc10, | 4, | hcc10, | 6, | dih10, | 0 |
| H, | 6, | hc11, | 5, | hcc11, | 4, | dih11, | 0 |
| H, | 7, | hc12, | 6, | hcc12, | 5, | dih12, | 0 |
| H, | 2, | hc13, | 1, | hcc13, | 3, | dih13, | 0 |
| O, | 2, | oc14, | 1, | occ14, | 13, | dih14, | 0 |
| O, | 2, | oc15, | 1, | occ15, | 13, | dih15, | 0 |
| H, | 15, | ho16, | 2, | hoc16, | 1, | dih16, | 0 |
| C, | 14, | co17, | 2, | coc17, | 1, | dih17, | 0 |
| H, | 17, | hc18, | 14, | hco18, | 2, | dih18, | 0 |
| H, | 17, | hc19, | 14, | hco19, | 18, | dih19, | 0 |
| H, | 17, | hc20, | 14, | hco20, | 18, | dih20, | 0 |

Variablen:

cc2=1.52037165
cc3=1.40243088
ccc3=121.62898348
cc4=1.39443278
ccc4=121.64620543
dih4=177.60386528
cc5=1.39439186
ccc5=119.56102176
dih5=-0.32935236
cc6=1.39461601
ccc6=119.90933251
dih6=0.32470954
cc7=1.39402103
ccc7=119.88439394
dih7=-0.04329688
clc8=1.76290449
clcc8=120.74487919
dih8=179.571177
hc9=1.08479602
hcc9=119.49076983
dih9=179.96615165
hc10=1.08642256
hcc10=119.54557575
dih10=179.72140082
hc11=1.08627174
hcc11=120.29381944
dih11=179.60199437
hc12=1.08409711
hcc12=120.53938036
dih12=178.74880685
hc13=1.09708655


```

hcc13=110.94593706
dih13=41.59392138
oc14=1.40573203
occ14=107.96180006
dih14=120.9214078
oc15=1.41575932
occ15=111.508437
dih15=-115.46172678
ho16=0.97233857
hoc16=106.90489015
dih16=-52.4874094
co17=1.42158634
coc17=113.48223619
dih17=-172.88237289
hc18=1.09233431
hco18=106.57545303
dih18=179.47242979
hc19=1.09563097
hco19=111.48076317
dih19=119.76277593
hc20=1.10032507
hco20=111.01450983
dih20=-118.73713399

```

1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol

```

C
C, 1, cc2
C, 1, cc3, 2, ccc3
C, 3, cc4, 1, ccc4, 2, dih4, 0
C, 4, cc5, 3, ccc5, 1, dih5, 0
C, 5, cc6, 4, ccc6, 3, dih6, 0
C, 6, cc7, 5, ccc7, 4, dih7, 0
Cl, 3, clc8, 1, clcc8, 4, dih8, 0
H, 4, hc9, 3, hcc9, 5, dih9, 0
H, 5, hc10, 4, hcc10, 6, dih10, 0
H, 6, hc11, 5, hcc11, 4, dih11, 0
H, 7, hc12, 6, hcc12, 5, dih12, 0
H, 2, hc13, 1, hcc13, 3, dih13, 0
O, 2, oc14, 1, occ14, 13, dih14, 0
O, 2, oc15, 1, occ15, 13, dih15, 0
H, 15, ho16, 2, hoc16, 1, dih16, 0
C, 14, co17, 2, coc17, 1, dih17, 0
C, 17, cc18, 14, cco18, 2, dih18, 0
H, 17, hc19, 14, hco19, 18, dih19, 0
H, 17, hc20, 14, hco20, 18, dih20, 0
H, 18, hc21, 17, hcc21, 14, dih21, 0

```

H, 18, hc22, 17, hcc22, 21, dih22, 0
H, 18, hc23, 17, hcc23, 21, dih23, 0

Variablen:

cc2=1.52087586
cc3=1.40242206
ccc3=121.65162768
cc4=1.39446231
ccc4=121.6551023
dih4=177.60703581
cc5=1.39438849
ccc5=119.56397765
dih5=-0.33576928
cc6=1.39462314
ccc6=119.90209234
dih6=0.33143835
cc7=1.39401644
ccc7=119.88144366
dih7=-0.0424116
clc8=1.76296474
clcc8=120.74713309
dih8=179.55682803
hc9=1.0848031
hcc9=119.49034445
dih9=179.96606829
hc10=1.08642988
hcc10=119.54876804
dih10=179.72137936
hc11=1.08629133
hcc11=120.29325506
dih11=179.60102531
hc12=1.08407737
hcc12=120.55330159
dih12=178.7242356
hc13=1.0968754
hcc13=110.87477454
dih13=41.58136402
oc14=1.40470695
occ14=108.03044291
dih14=121.01727558
oc15=1.41656227
occ15=111.41766043
dih15=-115.32766693
ho16=0.97230938
hoc16=106.85150832
dih16=-53.18103259
co17=1.42948932

```

coc17=114.00114712
dih17=-171.7163869
cc18=1.51892871
cco18=108.0763598
dih18=179.8717742
hc19=1.09684116
hco19=109.79249515
dih19=121.51450142
hc20=1.10180428
hco20=109.30687876
dih20=-120.69767724
hc21=1.09552154
hcc21=110.23147915
dih21=-179.56482237
hc22=1.09483543
hcc22=110.75316232
dih22=120.08773939
hc23=1.09506092
hcc23=110.64161672
dih23=-119.8426679

```

1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol

```

C
C, 1, cc2
C, 1, cc3, 2, ccc3
C, 3, cc4, 1, ccc4, 2, dih4, 0
C, 4, cc5, 3, ccc5, 1, dih5, 0
C, 5, cc6, 4, ccc6, 3, dih6, 0
C, 6, cc7, 5, ccc7, 4, dih7, 0
Cl, 3, clc8, 1, clcc8, 4, dih8, 0
H, 4, hc9, 3, hcc9, 5, dih9, 0
H, 5, hc10, 4, hcc10, 6, dih10, 0
H, 6, hc11, 5, hcc11, 4, dih11, 0
H, 7, hc12, 6, hcc12, 5, dih12, 0
H, 2, hc13, 1, hcc13, 3, dih13, 0
O, 2, oc14, 1, occ14, 13, dih14, 0
O, 2, oc15, 1, occ15, 13, dih15, 0
H, 15, ho16, 2, hoc16, 1, dih16, 0
C, 14, co17, 2, coc17, 1, dih17, 0
C, 17, cc18, 14, cco18, 2, dih18, 0
H, 17, hc19, 14, hco19, 18, dih19, 0
H, 17, hc20, 14, hco20, 18, dih20, 0
C, 18, cc21, 17, ccc21, 14, dih21, 0
H, 18, hc22, 17, hcc22, 21, dih22, 0
H, 18, hc23, 17, hcc23, 21, dih23, 0
H, 21, hc24, 18, hcc24, 17, dih24, 0

```

H, 21, hc25, 18, hcc25, 24, dih25, 0
H, 21, hc26, 18, hcc26, 24, dih26, 0

Variablen:

cc2=1.52077001
cc3=1.40234556
ccc3=121.68272654
cc4=1.39449012
ccc4=121.65677434
dih4=177.56534264
cc5=1.39436259
ccc5=119.56686629
dih5=-0.36899257
cc6=1.39464596
ccc6=119.90271046
dih6=0.29178425
cc7=1.39398517
ccc7=119.87480028
dih7=0.00092643
clc8=1.76297853
clcc8=120.74626301
dih8=179.63923399
hc9=1.08480235
hcc9=119.49053143
dih9=179.98634753
hc10=1.08641874
hcc10=119.55011265
dih10=179.75747824
hc11=1.08628753
hcc11=120.29457347
dih11=179.65878355
hc12=1.08414296
hcc12=120.52369641
dih12=178.8139757
hc13=1.09669047
hcc13=110.93402943
dih13=40.44099602
oc14=1.40451332
occ14=108.05120578
dih14=120.97010128
oc15=1.41645501
occ15=111.37746903
dih15=-115.34387504
ho16=0.97232341
hoc16=106.90228258
dih16=-52.833978
co17=1.42999586

```

coc17=114.13515793
dih17=-172.69971505
cc18=1.52343051
cco18=108.51089349
dih18=175.75232545
hc19=1.09693419
hco19=109.75707413
dih19=121.57333164
hc20=1.10273339
hco20=109.26661853
dih20=-120.61891589
cc21=1.53165421
ccc21=113.55728765
dih21=-63.20308408
hc22=1.09780426
hcc22=108.48515159
dih22=122.71265782
hc23=1.09824703
hcc23=107.73368678
dih23=-122.27825607
hc24=1.09559944
hcc24=111.12989923
dih24=179.21487691
hc25=1.09714552
hcc25=111.02938358
dih25=119.90707279
hc26=1.09418888
hcc26=110.83656694
dih26=-120.372863

```

1-Methoxy-3-Phenyl-1-Propanol

```

C
C, 1, cc2
C, 2, cc3, 1, ccc3
C, 3, cc4, 2, ccc4, 1, dih4, 0
C, 4, cc5, 3, ccc5, 2, dih5, 0
C, 5, cc6, 4, ccc6, 3, dih6, 0
C, 6, cc7, 5, ccc7, 4, dih7, 0
H, 3, hc8, 2, hcc8, 4, dih8, 0
H, 4, hc9, 3, hcc9, 5, dih9, 0
H, 5, hc10, 4, hcc10, 6, dih10, 0
H, 6, hc11, 5, hcc11, 4, dih11, 0
H, 7, hc12, 6, hcc12, 5, dih12, 0
H, 1, hc13, 2, hcc13, 3, dih13, 0
H, 1, hc14, 2, hcc14, 13, dih14, 0
C, 1, cc15, 2, ccc15, 13, dih15, 0

```

| | | | | | | | |
|----|-----|-------|-----|--------|-----|--------|---|
| C, | 15, | cc16, | 1, | ccc16, | 2, | dih16, | 0 |
| H, | 15, | hc17, | 1, | hcc17, | 16, | dih17, | 0 |
| H, | 15, | hc18, | 1, | hcc18, | 16, | dih18, | 0 |
| O, | 16, | oc19, | 15, | occ19, | 1, | dih19, | 0 |
| O, | 16, | oc20, | 15, | occ20, | 19, | dih20, | 0 |
| H, | 16, | hc21, | 15, | hcc21, | 19, | dih21, | 0 |
| C, | 20, | co22, | 16, | coc22, | 15, | dih22, | 0 |
| H, | 22, | hc23, | 20, | hco23, | 16, | dih23, | 0 |
| H, | 22, | hc24, | 20, | hco24, | 23, | dih24, | 0 |
| H, | 22, | hc25, | 20, | hco25, | 23, | dih25, | 0 |
| H, | 19, | ho26, | 16, | hoc26, | 15, | dih26, | 0 |

Variablen:

cc2=1.51408081
cc3=1.40150337
ccc3=120.76314403
cc4=1.39556169
ccc4=120.98992212
dih4=178.2841709
cc5=1.39599584
ccc5=120.12866961
dih5=0.05192709
cc6=1.39607851
ccc6=119.50669395
dih6=0.05688425
cc7=1.39544447
ccc7=120.11356357
dih7=-0.0775297
hc8=1.08815966
hcc8=119.28442311
dih8=179.69725238
hc9=1.08711441
hcc9=119.78127501
dih9=179.68481851
hc10=1.08678555
hcc10=120.25114125
dih10=179.71161999
hc11=1.08710423
hcc11=120.09513737
dih11=179.63524589
hc12=1.08833416
hcc12=119.6517397
dih12=179.65931244
hc13=1.09480023
hcc13=110.23664142
dih13=30.81954913
hc14=1.09850695

hcc14=109.61443172
dih14=117.25236373
cc15=1.540847
ccc15=112.62970204
dih15=-121.36766557
cc16=1.52632354
ccc16=113.65178306
dih16=-179.87064513
hc17=1.09599069
hcc17=110.27248964
dih17=121.2742561
hc18=1.09926378
hcc18=109.46486969
dih18=-121.09831643
oc19=1.41424955
occ19=112.16490254
dih19=174.33954149
oc20=1.40927626
occ20=107.34613091
dih20=123.50338999
hc21=1.1008472
hcc21=111.08988372
dih21=-116.0536574
co22=1.42079123
coc22=113.92040142
dih22=171.39735869
hc23=1.09269423
hco23=106.7672741
dih23=-179.93172576
hc24=1.10080652
hco24=111.16532178
dih24=118.82276027
hc25=1.09623151
hco25=111.52889876
dih25=-119.71172777
ho26=0.97242581
hoc26=106.70226373
dih26=57.48518514

8.2.4.2 B3LYP cc-pVTZ**8.2.4.2.1 Aldehyde****Formaldehyd**

C
 O, 1, oc2
 H, 1, hc3, 2, hco3
 H, 1, hc4, 2, hco4, 3, dih4, 0

Variablen:

oc2=1.199042
 hc3=1.10679119
 hco3=122.13721271
 hc4=1.10679119
 hco4=122.13721271
 dih4=180.

Acetaldehyd

C
 C, 1, R2
 H, 1, R3, 2, A3
 H, 1, R4, 2, A4, 3, D4, 0
 H, 1, R4, 2, A4, 3, -D4, 0
 O, 2, R6, 1, A6, 3, 0., 0
 H, 2, R7, 1, A7, 3, 180., 0

Variables:

R2=1.50144499
 R3=1.08745376
 R4=1.09326323
 R6=1.20335911
 R7=1.11073316
 A3=110.82882327
 A4=109.54492964
 A6=124.77213463
 A7=114.93266373
 D4=-121.71122274

Propanal

C
 C, 1, cc2
 H, 2, hc3, 1, hcc3
 H, 2, hc4, 1, hcc4, 3, dih4, 0
 H, 2, hc5, 1, hcc5, 3, dih5, 0
 C, 1, cc6, 2, ccc6, 3, dih6, 0

| | | | | | | | |
|----|----|-------|----|--------|----|--------|---|
| H, | 1, | hc7, | 2, | hcc7, | 6, | dih7, | 0 |
| H, | 1, | hc8, | 2, | hcc8, | 6, | dih8, | 0 |
| O, | 6, | oc9, | 1, | occ9, | 2, | dih9, | 0 |
| H, | 6, | hc10, | 9, | hco10, | 1, | dih10, | 0 |

Variablen:

```

cc2=1.52209747
hc3=1.08967727
hcc3=110.73751261
hc4=1.08929955
hcc4=110.96464655
dih4=120.41860413
hc5=1.08929955
hcc5=110.96464655
dih5=-120.41860413
cc6=1.505845
ccc6=114.62049801
dih6=180.
hc7=1.09668952
hcc7=111.72879688
dih7=121.63091669
hc8=1.09668952
hcc8=111.72879688
dih8=-121.63091669
oc9=1.20396435
occ9=125.00467216
dih9=0.
hc10=1.11081873
hco10=120.36816402
dih10=180.

```

Butanal

| | | | | | | | |
|----|----|-------|-----|--------|----|--------|---|
| C | | | | | | | |
| C, | 1, | cc2 | | | | | |
| H, | 2, | hc3, | 1, | hcc3 | | | |
| H, | 2, | hc4, | 1, | hcc4, | 3, | dih4, | 0 |
| H, | 2, | hc5, | 1, | hcc5, | 3, | dih5, | 0 |
| H, | 1, | hc6, | 2, | hcc6, | 3, | dih6, | 0 |
| C, | 1, | cc7, | 2, | ccc7, | 6, | dih7, | 0 |
| H, | 1, | hc8, | 2, | hcc8, | 6, | dih8, | 0 |
| C, | 7, | cc9, | 1, | ccc9, | 2, | dih9, | 0 |
| H, | 7, | hc10, | 1, | hcc10, | 9, | dih10, | 0 |
| H, | 7, | hc11, | 1, | hcc11, | 9, | dih11, | 0 |
| O, | 9, | oc12, | 7, | occ12, | 1, | dih12, | 0 |
| H, | 9, | hc13, | 12, | hco13, | 7, | dih13, | 0 |

Variablen:

```
cc2=1.52734894
hc3=1.09213243
hcc3=111.40021012
hc4=1.09213239
hcc4=111.40023977
dih4=120.07999108
hc5=1.09042938
hcc5=111.10576162
dih5=-119.95999206
hc6=1.09146181
hcc6=110.10356126
dih6=178.02759146
cc7=1.52403617
ccc7=112.70651266
dih7=121.93273376
hc8=1.09146167
hcc8=110.10354211
dih8=-116.13459063
cc9=1.50536526
ccc9=115.1560471
dih9=180.
hc10=1.09773455
hcc10=111.39988366
dih10=121.90549836
hc11=1.09773436
hcc11=111.39980202
dih11=-121.90546438
oc12=1.20417741
occ12=125.12547377
dih12=-0.00138339
hc13=1.11100333
hco13=120.29044745
dih13=180.
```

Heptanal

C

| | | | | | | | |
|----|----|-------|----|--------|----|--------|---|
| C, | 1, | cc2 | | | | | |
| H, | 2, | hc3, | 1, | hcc3 | | | |
| H, | 2, | hc4, | 1, | hcc4, | 3, | dih4, | 0 |
| H, | 2, | hc5, | 1, | hcc5, | 3, | dih5, | 0 |
| C, | 1, | cc6, | 2, | ccc6, | 3, | dih6, | 0 |
| H, | 1, | hc7, | 2, | hcc7, | 6, | dih7, | 0 |
| H, | 1, | hc8, | 2, | hcc8, | 6, | dih8, | 0 |
| C, | 6, | cc9, | 1, | ccc9, | 2, | dih9, | 0 |
| H, | 6, | hc10, | 1, | hcc10, | 9, | dih10, | 0 |

| | | | | | | | |
|----|-----|-------|-----|--------|-----|--------|---|
| H, | 6, | hc11, | 1, | hcc11, | 9, | dih11, | 0 |
| C, | 9, | cc12, | 6, | ccc12, | 1, | dih12, | 0 |
| H, | 9, | hc13, | 6, | hcc13, | 12, | dih13, | 0 |
| H, | 9, | hc14, | 6, | hcc14, | 12, | dih14, | 0 |
| C, | 12, | cc15, | 9, | ccc15, | 6, | dih15, | 0 |
| H, | 12, | hc16, | 9, | hcc16, | 15, | dih16, | 0 |
| H, | 12, | hc17, | 9, | hcc17, | 15, | dih17, | 0 |
| C, | 15, | cc18, | 12, | ccc18, | 9, | dih18, | 0 |
| H, | 15, | hc19, | 12, | hcc19, | 18, | dih19, | 0 |
| H, | 15, | hc20, | 12, | hcc20, | 18, | dih20, | 0 |
| O, | 18, | oc21, | 15, | occ21, | 12, | dih21, | 0 |
| H, | 18, | hc22, | 21, | hco22, | 15, | dih22, | 0 |

Variablen:

cc2=1.5278165
hc3=1.09089901
hcc3=111.47052509
hc4=1.09197992
hcc4=111.17419647
dih4=120.13513469
hc5=1.09197997
hcc5=111.17417783
dih5=-120.1351344
cc6=1.52916834
ccc6=113.27023388
dih6=179.99864267
hc7=1.09428888
hcc7=109.44371265
dih7=122.10548789
hc8=1.09428884
hcc8=109.44378232
dih8=-122.1055716
cc9=1.52891435
ccc9=113.65185363
dih9=-179.99972543
hc10=1.09504112
hcc10=109.22780331
dih10=122.26534251
hc11=1.0950412
hcc11=109.2277984
dih11=-122.26525124
cc12=1.52892384
ccc12=113.34576377
dih12=179.99945348
hc13=1.09540697
hcc13=109.19553532
dih13=122.27528002

hc14=1.09540706
 hcc14=109.19554358
 dih14=-122.27528429
 cc15=1.52378484
 ccc15=112.98831931
 dih15=179.99961551
 hc16=1.09237978
 hcc16=109.90878692
 dih16=122.06557218
 hc17=1.09238006
 hcc17=109.90877693
 dih17=-122.06548219
 cc18=1.50529161
 ccc18=115.17189994
 dih18=179.99966479
 hc19=1.09765444
 hcc19=111.44982361
 dih19=121.87789021
 hc20=1.09765417
 hcc20=111.44998019
 dih20=-121.87808459
 oc21=1.20419452
 occ21=125.17123784
 dih21=-0.0009052
 hc22=1.11105309
 hco22=120.27191094
 dih22=-179.99990868

3-Phenylpropanal

C
 C, 1, cc2
 C, 2, cc3, 1, ccc3
 C, 3, cc4, 2, ccc4, 1, dih4, 0
 C, 4, cc5, 3, ccc5, 2, dih5, 0
 C, 5, cc6, 4, ccc6, 3, dih6, 0
 C, 6, cc7, 5, ccc7, 4, dih7, 0
 Cl, 3, clc8, 2, clcc8, 4, dih8, 0
 H, 4, hc9, 3, hcc9, 5, dih9, 0
 H, 5, hc10, 4, hcc10, 6, dih10, 0
 H, 6, hc11, 5, hcc11, 4, dih11, 0
 H, 7, hc12, 6, hcc12, 5, dih12, 0
 O, 1, oc13, 2, occ13, 3, dih13, 0
 H, 1, hc14, 13, hco14, 2, dih14, 0 C
 C, 1, cc2
 C, 1, cc3, 2, ccc3
 C, 3, cc4, 1, ccc4, 2, dih4, 0

| | | | | | | | |
|----|-----|-------|-----|--------|-----|--------|---|
| C, | 4, | cc5, | 3, | ccc5, | 1, | dih5, | 0 |
| C, | 5, | cc6, | 4, | ccc6, | 3, | dih6, | 0 |
| C, | 6, | cc7, | 5, | ccc7, | 4, | dih7, | 0 |
| H, | 3, | hc8, | 1, | hcc8, | 4, | dih8, | 0 |
| H, | 4, | hc9, | 3, | hcc9, | 5, | dih9, | 0 |
| H, | 5, | hc10, | 4, | hcc10, | 6, | dih10, | 0 |
| H, | 6, | hc11, | 5, | hcc11, | 4, | dih11, | 0 |
| H, | 7, | hc12, | 6, | hcc12, | 5, | dih12, | 0 |
| H, | 2, | hc13, | 1, | hcc13, | 3, | dih13, | 0 |
| H, | 2, | hc14, | 1, | hcc14, | 13, | dih14, | 0 |
| C, | 2, | cc15, | 1, | ccc15, | 13, | dih15, | 0 |
| C, | 15, | cc16, | 2, | ccc16, | 1, | dih16, | 0 |
| H, | 15, | hc17, | 2, | hcc17, | 16, | dih17, | 0 |
| H, | 15, | hc18, | 2, | hcc18, | 16, | dih18, | 0 |
| O, | 16, | oc19, | 15, | occ19, | 2, | dih19, | 0 |
| H, | 16, | hc20, | 19, | hco20, | 15, | dih20, | 0 |

Variablen:

cc2=1.50921933

cc3=1.39570105

ccc3=120.87836

cc4=1.38982211

ccc4=121.00247298

dih4=-178.47935427

cc5=1.389985

ccc5=120.13653261

dih5=-0.05106416

cc6=1.38998485

ccc6=119.49049157

dih6=-0.15448481

cc7=1.38982201

ccc7=120.13654296

dih7=0.15449208

hc8=1.0834777

hcc8=119.42102434

dih8=-179.47529872

hc9=1.0821156

hcc9=119.79497391

dih9=-179.63331997

hc10=1.08172984

hcc10=120.25414329

dih10=-179.6019964

hc11=1.08211533

hcc11=120.06747455

dih11=-179.47778819

hc12=1.08347756

hcc12=119.57446873

dih12=-179.42342615
 hc13=1.09065262
 hcc13=110.18639294
 dih13=-149.03493583
 hc14=1.09065284
 hcc14=110.18634399
 dih14=116.76670236
 cc15=1.53131909
 ccc15=112.52735658
 dih15=-121.61669052
 cc16=1.50523409
 ccc16=114.58987911
 dih16=-179.99948882
 hc17=1.09644875
 hcc17=111.27701989
 dih17=121.91561693
 hc18=1.09644852
 hcc18=111.27704191
 dih18=-121.91571273
 oc19=1.2041583
 occ19=125.07255646
 dih19=-0.00028229
 hc20=1.11068546
 hco20=120.372479
 dih20=-179.99993874

2-Chlorbenzaldehyd

C
 C, 1, cc2
 C, 2, cc3, 1, ccc3
 C, 3, cc4, 2, ccc4, 1, dih4, 0
 C, 4, cc5, 3, ccc5, 2, dih5, 0
 C, 5, cc6, 4, ccc6, 3, dih6, 0
 C, 6, cc7, 5, ccc7, 4, dih7, 0
 Cl, 3, clc8, 2, clcc8, 4, dih8, 0
 H, 4, hc9, 3, hcc9, 5, dih9, 0
 H, 5, hc10, 4, hcc10, 6, dih10, 0
 H, 6, hc11, 5, hcc11, 4, dih11, 0
 H, 7, hc12, 6, hcc12, 5, dih12, 0
 O, 1, oc13, 2, occ13, 3, dih13, 0
 H, 1, hc14, 13, hco14, 2, dih14, 0

Variablen:

cc2=1.48473277
 cc3=1.39823269
 ccc3=123.38425294

```

cc4=1.38845828
ccc4=121.19334019
dih4=179.99985111
cc5=1.38796151
ccc5=119.46425285
dih5=0.00026552
cc6=1.39272672
ccc6=120.43779315
dih6=-0.00008883
cc7=1.38250459
ccc7=119.53549568
dih7=-0.00011107
clc8=1.75585891
clcc8=121.31661829
dih8=180.
hc9=1.079982
hcc9=119.63180779
dih9=180.
hc10=1.08169211
hcc10=119.30557654
dih10=179.99992174
hc11=1.08105598
hcc11=120.22970598
dih11=179.99982412
hc12=1.08135926
hcc12=121.46163884
dih12=-179.99975868
oc13=1.20937396
occ13=123.32626581
dih13=-179.99813965
hc14=1.10102998
hco14=120.79250294
dih14=-179.9999288

```

8.2.4.2.2 Alkohole

Methanol

```

C
O,  1,  oc2
H,  1,  hc3,  2,  hco3
H,  1,  hc4,  2,  hco4,  3,  dih4,  0
H,  1,  hc5,  2,  hco5,  3,  dih5,  0
H,  2,  ho6,  1,  hoc6,  3,  dih6,  0

```

Variablen:

```
oc2=1.42009543
```

hc3=1.09517172
 hco3=112.3924902
 hc4=1.08866654
 hco4=106.88270836
 dih4=118.50895261
 hc5=1.09517172
 hco5=112.3924902
 dih5=-122.98209478
 ho6=0.960632
 hoc6=108.5186397
 dih6=61.49104739

Ethanol

C

| | | | | | | | |
|----|----|------|----|-------|----|-------|---|
| C, | 1, | cc2 | | | | | |
| H, | 1, | hc3, | 2, | hcc3 | | | |
| H, | 1, | hc4, | 2, | hcc4, | 3, | dih4, | 0 |
| H, | 1, | hc5, | 2, | hcc5, | 3, | dih5, | 0 |
| H, | 2, | hc6, | 1, | hcc6, | 3, | dih6, | 0 |
| O, | 2, | oc7, | 1, | occ7, | 6, | dih7, | 0 |
| H, | 2, | hc8, | 1, | hcc8, | 6, | dih8, | 0 |
| H, | 7, | ho9, | 2, | hoc9, | 1, | dih9, | 0 |

Variablen:

cc2=1.51454578
 hc3=1.09015606
 hcc3=110.48321934
 hc4=1.09015473
 hcc4=110.48357781
 dih4=119.76604075
 hc5=1.09092499
 hcc5=110.53647855
 dih5=-120.11657648
 hc6=1.09660395
 hcc6=110.01144527
 dih6=179.27494656
 oc7=1.42656899
 occ7=107.99512924
 dih7=120.84206464
 hc8=1.09660582
 hcc8=110.01063118
 dih8=-118.31631078
 ho9=0.96090733
 hoc9=108.75392587
 dih9=179.99933566

1-Propanol

C

| | | | | | | | |
|----|----|-------|----|--------|----|--------|---|
| C, | 1, | cc2 | | | | | |
| H, | 1, | hc3, | 2, | hcc3 | | | |
| H, | 1, | hc4, | 2, | hcc4, | 3, | dih4, | 0 |
| H, | 1, | hc5, | 2, | hcc5, | 3, | dih5, | 0 |
| H, | 2, | hc6, | 1, | hcc6, | 3, | dih6, | 0 |
| C, | 2, | cc7, | 1, | ccc7, | 6, | dih7, | 0 |
| H, | 2, | hc8, | 1, | hcc8, | 6, | dih8, | 0 |
| O, | 7, | oc9, | 2, | occ9, | 1, | dih9, | 0 |
| H, | 7, | hc10, | 2, | hcc10, | 9, | dih10, | 0 |
| H, | 7, | hc11, | 2, | hcc11, | 9, | dih11, | 0 |
| H, | 9, | ho12, | 7, | hoc12, | 2, | dih12, | 0 |

Variablen:

cc2=1.5271788

hc3=1.09202177

hcc3=110.92230267

hc4=1.08957763

hcc4=110.81974485

dih4=119.45341135

hc5=1.09056696

hcc5=111.3517908

dih5=-120.01574477

hc6=1.09572193

hcc6=109.93537833

dih6=175.40890288

cc7=1.52532682

ccc7=113.47758837

dih7=122.10753274

hc8=1.09433641

hcc8=110.19627305

dih8=-116.47437971

oc9=1.42622937

occ9=113.36971762

dih9=-60.67854101

hc10=1.09157583

hcc10=110.06442677

dih10=117.50052504

hc11=1.09624045

hcc11=110.01550298

dih11=-124.39794365

ho12=0.96201065

hoc12=108.33580295

dih12=-64.51202399

8.2.4.2.3 Halbacetale

Methoxyethanol

C

| | | | | | | | |
|----|----|-------|----|--------|-----|--------|---|
| O, | 1, | oc2 | | | | | |
| C, | 2, | co3, | 1, | coc3 | | | |
| H, | 3, | hc4, | 2, | hco4, | 1, | dih4, | 0 |
| H, | 3, | hc5, | 2, | hco5, | 4, | dih5, | 0 |
| H, | 3, | hc6, | 2, | hco6, | 4, | dih6, | 0 |
| C, | 1, | cc7, | 2, | cco7, | 3, | dih7, | 0 |
| O, | 1, | oc8, | 2, | oco8, | 7, | dih8, | 0 |
| H, | 1, | hc9, | 2, | hco9, | 7, | dih9, | 0 |
| H, | 8, | ho10, | 1, | hoc10, | 2, | dih10, | 0 |
| H, | 7, | hc11, | 1, | hcc11, | 2, | dih11, | 0 |
| H, | 7, | hc12, | 1, | hcc12, | 11, | dih12, | 0 |
| H, | 7, | hc13, | 1, | hcc13, | 11, | dih13, | 0 |

Variablen:

oc2=1.40679001
 co3=1.41988171
 coc3=114.14606133
 hc4=1.0876837
 hco4=106.90440825
 dih4=-179.45641857
 hc5=1.09600693
 hco5=111.00911989
 dih5=118.77977623
 hc6=1.09173823
 hco6=111.5677515
 dih6=-119.67863265
 cc7=1.51552603
 cco7=107.28387332
 dih7=170.32115294
 oc8=1.41515317
 oco8=112.0388267
 dih8=123.94904916
 hc9=1.0960464
 hco9=109.83995661
 dih9=-121.0454709
 ho10=0.96448755
 hoc10=107.79442548
 dih10=-65.63588746
 hc11=1.08866843
 hcc11=110.06138015
 dih11=179.13639943
 hc12=1.0891537
 hcc12=110.53993281

dih12=120.76509514
 hc13=1.09189267
 hcc13=109.81512843
 dih13=-120.04131051

Ethoxyethanol

C
 O, 1, oc2
 C, 2, co3, 1, coc3
 C, 3, cc4, 2, cco4, 1, dih4, 0
 H, 3, hc5, 2, hco5, 4, dih5, 0
 H, 3, hc6, 2, hco6, 4, dih6, 0
 C, 1, cc7, 2, cco7, 3, dih7, 0
 O, 1, oc8, 2, oco8, 7, dih8, 0
 H, 1, hc9, 2, hco9, 7, dih9, 0
 H, 8, ho10, 1, hoc10, 2, dih10, 0
 H, 7, hc11, 1, hcc11, 2, dih11, 0
 H, 7, hc12, 1, hcc12, 11, dih12, 0
 H, 7, hc13, 1, hcc13, 11, dih13, 0
 H, 4, hc14, 3, hcc14, 2, dih14, 0
 H, 4, hc15, 3, hcc15, 14, dih15, 0
 H, 4, hc16, 3, hcc16, 14, dih16, 0

Variablen:

oc2=1.40442861
 co3=1.43017908
 coc3=116.17620658
 cc4=1.52094983
 cco4=112.93683984
 dih4=97.17814921
 hc5=1.09157618
 hco5=105.77576578
 dih5=120.43270841
 hc6=1.09482568
 hco6=109.59609175
 dih6=-123.72662672
 cc7=1.51646173
 cco7=107.28813294
 dih7=167.87782312
 oc8=1.41784243
 oco8=112.62413925
 dih8=124.00077767
 hc9=1.09535414
 hco9=109.84970179
 dih9=-120.91951073
 ho10=0.96449007

hoc10=107.80162227
 dih10=-65.24674691
 hc11=1.08873322
 hcc11=110.01385601
 dih11=178.99607038
 hc12=1.08912123
 hcc12=110.55838793
 dih12=120.77758764
 hc13=1.09182975
 hcc13=109.84520416
 dih13=-119.99453868
 hc14=1.09219318
 hcc14=110.01577459
 dih14=174.15417148
 hc15=1.08833818
 hcc15=110.99934119
 dih15=120.16617566
 hc16=1.09060064
 hcc16=110.33771589
 dih16=-119.1774398

Propoxyethanol

C
 O, 1, oc2
 C, 2, co3, 1, coc3
 C, 3, cc4, 2, cco4, 1, dih4, 0
 H, 3, hc5, 2, hco5, 4, dih5, 0
 H, 3, hc6, 2, hco6, 4, dih6, 0
 C, 1, cc7, 2, cco7, 3, dih7, 0
 O, 1, oc8, 2, oco8, 7, dih8, 0
 H, 1, hc9, 2, hco9, 7, dih9, 0
 H, 8, ho10, 1, hoc10, 2, dih10, 0
 H, 7, hc11, 1, hcc11, 2, dih11, 0
 H, 7, hc12, 1, hcc12, 11, dih12, 0
 H, 7, hc13, 1, hcc13, 11, dih13, 0
 C, 4, cc14, 3, ccc14, 2, dih14, 0
 H, 4, hc15, 3, hcc15, 14, dih15, 0
 H, 4, hc16, 3, hcc16, 14, dih16, 0
 H, 14, hc17, 4, hcc17, 3, dih17, 0
 H, 14, hc18, 4, hcc18, 17, dih18, 0
 H, 14, hc19, 4, hcc19, 17, dih19, 0

Variablen:

oc2=1.40573352
 co3=1.42756405
 coc3=114.68032861

cc4=1.51861253
cco4=108.91317334
dih4=-178.58673364
hc5=1.09871975
hco5=109.21552336
dih5=120.69613955
hc6=1.09277906
hco6=109.78493001
dih6=-121.37498039
cc7=1.51598763
cco7=107.42370161
dih7=169.55910955
oc8=1.41594441
oco8=112.04680243
dih8=123.9106721
hc9=1.09573328
hco9=109.89138683
dih9=-121.06473075
ho10=0.96444115
hoc10=107.77188153
dih10=-65.2561382
hc11=1.08870755
hcc11=110.04033457
dih11=178.8128552
hc12=1.08921811
hcc12=110.57794495
dih12=120.73245532
hc13=1.09189863
hcc13=109.83647974
dih13=-120.01978662
cc14=1.5276173
ccc14=113.79424023
dih14=63.41823157
hc15=1.09340073
hcc15=107.68238334
dih15=122.24717465
hc16=1.0928022
hcc16=108.46724265
dih16=-122.77309592
hc17=1.09066959
hcc17=111.12002391
dih17=179.99899487
hc18=1.08927304
hcc18=110.91750588
dih18=120.25963816
hc19=1.09235104

hcc19=111.04609898
dih19=-119.85019413

1-Methoxy-1-Propanol

C
O, 1, oc2
C, 2, co3, 1, coc3
H, 3, hc4, 2, hco4, 1, dih4, 0
H, 3, hc5, 2, hco5, 4, dih5, 0
H, 3, hc6, 2, hco6, 4, dih6, 0
C, 1, cc7, 2, cco7, 3, dih7, 0
O, 1, oc8, 2, oco8, 7, dih8, 0
H, 1, hc9, 2, hco9, 7, dih9, 0
H, 8, ho10, 1, hoc10, 2, dih10, 0
C, 7, cc11, 1, ccc11, 2, dih11, 0
H, 7, hc12, 1, hcc12, 11, dih12, 0
H, 7, hc13, 1, hcc13, 11, dih13, 0
H, 11, hc14, 7, hcc14, 1, dih14, 0
H, 11, hc15, 7, hcc15, 14, dih15, 0
H, 11, hc16, 7, hcc16, 14, dih16, 0

Variablen:

oc2=1.40668005
co3=1.41986005
coc3=114.29048785
hc4=1.08774609
hco4=106.91934788
dih4=-179.30578219
hc5=1.09581773
hco5=111.00920735
dih5=118.80118662
hc6=1.09174669
hco6=111.52442072
dih6=-119.64896867
cc7=1.52138384
cco7=107.72166324
dih7=169.57774193
oc8=1.41472215
oco8=111.85468308
dih8=123.93502839
hc9=1.09691206
hco9=109.83952783
dih9=-120.95350751
ho10=0.96448487
hoc10=107.77004141
dih10=-65.41489083

```

cc11=1.52678013
ccc11=113.72321751
dih11=-63.29924975
hc12=1.09462519
hcc12=107.71216931
dih12=122.2297219
hc13=1.0911513
hcc13=107.33344266
dih13=-122.61607796
hc14=1.09033062
hcc14=110.8804841
dih14=-179.30048566
hc15=1.09205656
hcc15=111.09285859
dih15=119.55257705
hc16=1.08879281
hcc16=110.94817501
dih16=-120.3565988

```

1-Ethoxy-1-Propanol

```

C
O, 1, oc2
C, 2, co3, 1, coc3
C, 3, cc4, 2, cco4, 1, dih4, 0
H, 3, hc5, 2, hco5, 4, dih5, 0
H, 3, hc6, 2, hco6, 4, dih6, 0
C, 1, cc7, 2, cco7, 3, dih7, 0
O, 1, oc8, 2, oco8, 7, dih8, 0
H, 1, hc9, 2, hco9, 7, dih9, 0
H, 8, ho10, 1, hoc10, 2, dih10, 0
C, 7, cc11, 1, ccc11, 2, dih11, 0
H, 7, hc12, 1, hcc12, 11, dih12, 0
H, 7, hc13, 1, hcc13, 11, dih13, 0
H, 11, hc14, 7, hcc14, 1, dih14, 0
H, 11, hc15, 7, hcc15, 14, dih15, 0
H, 11, hc16, 7, hcc16, 14, dih16, 0
H, 4, hc17, 3, hcc17, 2, dih17, 0
H, 4, hc18, 3, hcc18, 17, dih18, 0
H, 4, hc19, 3, hcc19, 17, dih19, 0

```

Variablen:

```

oc2=1.40577585
co3=1.42734205
coc3=114.73037397
cc4=1.51421357
cco4=108.44089525

```

dih4=-179.94500125
hc5=1.09730739
hco5=109.25523305
dih5=120.76335599
hc6=1.09291842
hco6=109.79061173
dih6=-121.40299159
cc7=1.52181719
cco7=107.83199784
dih7=168.67918315
oc8=1.41558932
oco8=111.8881616
dih8=123.88921701
hc9=1.09670715
hco9=109.92186953
dih9=-120.95351446
ho10=0.96442597
hoc10=107.72751204
dih10=-64.96394618
cc11=1.52672481
ccc11=113.75313118
dih11=-63.47359345
hc12=1.0946192
hcc12=107.73019951
dih12=122.25969407
hc13=1.09116537
hcc13=107.31532977
dih13=-122.59382028
hc14=1.09035573
hcc14=110.88529299
dih14=-179.11091337
hc15=1.09208427
hcc15=111.0946239
dih15=119.54739949
hc16=1.08880365
hcc16=110.96719884
dih16=-120.34384863
hc17=1.09085619
hcc17=110.21090116
dih17=179.80062517
hc18=1.09013457
hcc18=110.64192305
dih18=119.8134616
hc19=1.0901251
hcc19=110.86230691

dih19=-120.06457151

1-Propoxy-1-Propanol

C

| | | | | | | | |
|----|-----|-------|----|--------|-----|--------|---|
| O, | 1, | oc2 | | | | | |
| C, | 2, | co3, | 1, | coc3 | | | |
| C, | 3, | cc4, | 2, | cco4, | 1, | dih4, | 0 |
| H, | 3, | hc5, | 2, | hco5, | 4, | dih5, | 0 |
| H, | 3, | hc6, | 2, | hco6, | 4, | dih6, | 0 |
| C, | 1, | cc7, | 2, | cco7, | 3, | dih7, | 0 |
| O, | 1, | oc8, | 2, | oco8, | 7, | dih8, | 0 |
| H, | 1, | hc9, | 2, | hco9, | 7, | dih9, | 0 |
| H, | 8, | ho10, | 1, | hoc10, | 2, | dih10, | 0 |
| C, | 7, | cc11, | 1, | ccc11, | 2, | dih11, | 0 |
| H, | 7, | hc12, | 1, | hcc12, | 11, | dih12, | 0 |
| H, | 7, | hc13, | 1, | hcc13, | 11, | dih13, | 0 |
| H, | 11, | hc14, | 7, | hcc14, | 1, | dih14, | 0 |
| H, | 11, | hc15, | 7, | hcc15, | 14, | dih15, | 0 |
| H, | 11, | hc16, | 7, | hcc16, | 14, | dih16, | 0 |
| C, | 4, | cc17, | 3, | ccc17, | 2, | dih17, | 0 |
| H, | 4, | hc18, | 3, | hcc18, | 17, | dih18, | 0 |
| H, | 4, | hc19, | 3, | hcc19, | 17, | dih19, | 0 |
| H, | 17, | hc20, | 4, | hcc20, | 3, | dih20, | 0 |
| H, | 17, | hc21, | 4, | hcc21, | 20, | dih21, | 0 |
| H, | 17, | hc22, | 4, | hcc22, | 20, | dih22, | 0 |

Variablen:

oc2=1.40592004
co3=1.42779185
coc3=114.7641041
cc4=1.51862905
cco4=108.9806638
dih4=178.70833686
hc5=1.09713294
hco5=109.16086306
dih5=120.64507452
hc6=1.09410931
hco6=109.73611753
dih6=-121.37511934
cc7=1.52187746
cco7=107.87466926
dih7=168.33829644
oc8=1.41528709
oco8=111.89662068
dih8=123.93332908
hc9=1.09671432

hco9=109.87495718
dih9=-120.91702243
ho10=0.96441613
hoc10=107.75531857
dih10=-64.86062152
cc11=1.52673063
ccc11=113.76489236
dih11=-63.46350696
hc12=1.09463617
hcc12=107.76879883
dih12=122.31949654
hc13=1.0911703
hcc13=107.29075456
dih13=-122.56369978
hc14=1.09035455
hcc14=110.88368064
dih14=-179.11271593
hc15=1.09207191
hcc15=111.08813969
dih15=119.54178917
hc16=1.08880573
hcc16=110.98448067
dih16=-120.35449113
cc17=1.52785056
ccc17=113.63069562
dih17=-64.61175365
hc18=1.09275638
hcc18=108.68556723
dih18=122.84863884
hc19=1.09342318
hcc19=107.66314011
dih19=-121.99770256
hc20=1.09063784
hcc20=111.11561522
dih20=-179.73027712
hc21=1.09224631
hcc21=111.0276962
dih21=119.86893428
hc22=1.08937007
hcc22=110.91090317
dih22=-120.20764481

1-Methoxy-1-Butanol

C
O, 1, oc2
C, 2, co3, 1, coc3

| | | | | | | | |
|----|-----|-------|-----|--------|-----|--------|---|
| H, | 3, | hc4, | 2, | hco4, | 1, | dih4, | 0 |
| H, | 3, | hc5, | 2, | hco5, | 4, | dih5, | 0 |
| H, | 3, | hc6, | 2, | hco6, | 4, | dih6, | 0 |
| C, | 1, | cc7, | 2, | cco7, | 3, | dih7, | 0 |
| O, | 1, | oc8, | 2, | oco8, | 7, | dih8, | 0 |
| H, | 1, | hc9, | 2, | hco9, | 7, | dih9, | 0 |
| H, | 8, | ho10, | 1, | hoc10, | 2, | dih10, | 0 |
| C, | 7, | cc11, | 1, | ccc11, | 2, | dih11, | 0 |
| H, | 7, | hc12, | 1, | hcc12, | 11, | dih12, | 0 |
| H, | 7, | hc13, | 1, | hcc13, | 11, | dih13, | 0 |
| C, | 11, | cc14, | 7, | ccc14, | 1, | dih14, | 0 |
| H, | 11, | hc15, | 7, | hcc15, | 14, | dih15, | 0 |
| H, | 11, | hc16, | 7, | hcc16, | 14, | dih16, | 0 |
| H, | 14, | hc17, | 11, | hcc17, | 7, | dih17, | 0 |
| H, | 14, | hc18, | 11, | hcc18, | 17, | dih18, | 0 |
| H, | 14, | hc19, | 11, | hcc19, | 17, | dih19, | 0 |

Variablen:

oc2=1.40699472

co3=1.4198782

coc3=114.27744186

hc4=1.0877538

hco4=106.91197555

dih4=-179.16744239

hc5=1.09583282

hco5=111.01097345

dih5=118.7959403

hc6=1.09172867

hco6=111.53283276

dih6=-119.65045313

cc7=1.52089724

cco7=107.75111894

dih7=169.73606899

oc8=1.41510377

oco8=111.82868327

dih8=123.94595735

hc9=1.0967815

hco9=109.80788161

dih9=-121.0396488

ho10=0.96445537

hoc10=107.76912066

dih10=-65.75741788

cc11=1.52861659

ccc11=114.16652823

dih11=-63.74548124

hc12=1.09559482

hcc12=107.84020866

dih12=122.25292794
 hc13=1.09221191
 hcc13=107.4430357
 dih13=-122.53838826
 cc14=1.52773118
 ccc14=112.7565441
 dih14=-179.2845465
 hc15=1.09435588
 hcc15=109.1178729
 dih15=121.77202473
 hc16=1.09073863
 hcc16=109.03071076
 dih16=-122.40337187
 hc17=1.09074737
 hcc17=111.29670423
 dih17=179.77898856
 hc18=1.09199832
 hcc18=111.14852129
 dih18=119.94657768
 hc19=1.09209486
 hcc19=111.36471985
 dih19=-120.15378299

1-Ethoxy-1-Butanol

| | | | | | | | |
|----|-----|-------|-----|--------|-----|--------|---|
| C | | | | | | | |
| O, | 1, | oc2 | | | | | |
| C, | 2, | co3, | 1, | coc3 | | | |
| C, | 3, | cc4, | 2, | cco4, | 1, | dih4, | 0 |
| H, | 3, | hc5, | 2, | hco5, | 4, | dih5, | 0 |
| H, | 3, | hc6, | 2, | hco6, | 4, | dih6, | 0 |
| C, | 1, | cc7, | 2, | cco7, | 3, | dih7, | 0 |
| O, | 1, | oc8, | 2, | oco8, | 7, | dih8, | 0 |
| H, | 1, | hc9, | 2, | hco9, | 7, | dih9, | 0 |
| H, | 8, | ho10, | 1, | hoc10, | 2, | dih10, | 0 |
| C, | 7, | cc11, | 1, | ccc11, | 2, | dih11, | 0 |
| H, | 7, | hc12, | 1, | hcc12, | 11, | dih12, | 0 |
| H, | 7, | hc13, | 1, | hcc13, | 11, | dih13, | 0 |
| C, | 11, | cc14, | 7, | ccc14, | 1, | dih14, | 0 |
| H, | 11, | hc15, | 7, | hcc15, | 14, | dih15, | 0 |
| H, | 11, | hc16, | 7, | hcc16, | 14, | dih16, | 0 |
| H, | 14, | hc17, | 11, | hcc17, | 7, | dih17, | 0 |
| H, | 14, | hc18, | 11, | hcc18, | 17, | dih18, | 0 |
| H, | 14, | hc19, | 11, | hcc19, | 17, | dih19, | 0 |
| H, | 4, | hc20, | 3, | hcc20, | 2, | dih20, | 0 |
| H, | 4, | hc21, | 3, | hcc21, | 20, | dih21, | 0 |
| H, | 4, | hc22, | 3, | hcc22, | 20, | dih22, | 0 |

Variablen:

oc2=1.40609189
co3=1.42734452
coc3=114.71333461
cc4=1.5142326
cco4=108.4400304
dih4=-179.79460622
hc5=1.09732112
hco5=109.26073597
dih5=120.76557681
hc6=1.09289563
hco6=109.79611073
dih6=-121.40212499
cc7=1.52132051
cco7=107.8636059
dih7=168.89571706
oc8=1.415989
oco8=111.86319473
dih8=123.89579775
hc9=1.09658244
hco9=109.89168777
dih9=-121.0452001
ho10=0.96440089
hoc10=107.72874615
dih10=-65.31728273
cc11=1.5285576
ccc11=114.20663224
dih11=-63.92924914
hc12=1.09558003
hcc12=107.85649669
dih12=122.28226179
hc13=1.09222734
hcc13=107.42221939
dih13=-122.51900349
cc14=1.52776033
ccc14=112.75943105
dih14=-179.09741718
hc15=1.09437507
hcc15=109.12265923
dih15=121.76886206
hc16=1.0907481
hcc16=109.04769367
dih16=-122.38995767
hc17=1.09077073
hcc17=111.30365747
dih17=179.78676283

hc18=1.09200727
 hcc18=111.15183802
 dih18=119.95166081
 hc19=1.0920862
 hcc19=111.3598242
 dih19=-120.15408068
 hc20=1.09086153
 hcc20=110.20910933
 dih20=179.83652796
 hc21=1.09013881
 hcc21=110.64086967
 dih21=119.80888928
 hc22=1.09012602
 hcc22=110.86818058
 dih22=-120.06669299

1-Methoxy-1-Heptanol

| | | | | | | | |
|----|-----|-------|-----|--------|-----|--------|---|
| C | | | | | | | |
| O, | 1, | oc2 | | | | | |
| C, | 2, | co3, | 1, | coc3 | | | |
| H, | 3, | hc4, | 2, | hco4, | 1, | dih4, | 0 |
| H, | 3, | hc5, | 2, | hco5, | 4, | dih5, | 0 |
| H, | 3, | hc6, | 2, | hco6, | 4, | dih6, | 0 |
| C, | 1, | cc7, | 2, | cco7, | 3, | dih7, | 0 |
| O, | 1, | oc8, | 2, | oco8, | 7, | dih8, | 0 |
| H, | 1, | hc9, | 2, | hco9, | 7, | dih9, | 0 |
| H, | 8, | ho10, | 1, | hoc10, | 2, | dih10, | 0 |
| C, | 7, | cc11, | 1, | ccc11, | 2, | dih11, | 0 |
| H, | 7, | hc12, | 1, | hcc12, | 11, | dih12, | 0 |
| H, | 7, | hc13, | 1, | hcc13, | 11, | dih13, | 0 |
| C, | 11, | cc14, | 7, | ccc14, | 1, | dih14, | 0 |
| H, | 11, | hc15, | 7, | hcc15, | 14, | dih15, | 0 |
| H, | 11, | hc16, | 7, | hcc16, | 14, | dih16, | 0 |
| C, | 14, | cc17, | 11, | ccc17, | 7, | dih17, | 0 |
| H, | 14, | hc18, | 11, | hcc18, | 17, | dih18, | 0 |
| H, | 14, | hc19, | 11, | hcc19, | 17, | dih19, | 0 |
| C, | 17, | cc20, | 14, | ccc20, | 11, | dih20, | 0 |
| H, | 17, | hc21, | 14, | hcc21, | 20, | dih21, | 0 |
| H, | 17, | hc22, | 14, | hcc22, | 20, | dih22, | 0 |
| C, | 20, | cc23, | 17, | ccc23, | 14, | dih23, | 0 |
| H, | 20, | hc24, | 17, | hcc24, | 23, | dih24, | 0 |
| H, | 20, | hc25, | 17, | hcc25, | 23, | dih25, | 0 |
| H, | 23, | hc26, | 20, | hcc26, | 17, | dih26, | 0 |
| H, | 23, | hc27, | 20, | hcc27, | 26, | dih27, | 0 |
| H, | 23, | hc28, | 20, | hcc28, | 26, | dih28, | 0 |

Variablen:

oc2=1.40704605
co3=1.41984543
coc3=114.27701387
hc4=1.08775962
hco4=106.91368485
dih4=-179.27844611
hc5=1.09583235
hco5=111.00997967
dih5=118.7931249
hc6=1.09173987
hco6=111.5304389
dih6=-119.65028914
cc7=1.52098236
cco7=107.76792508
dih7=169.68651332
oc8=1.41521967
oco8=111.80331817
dih8=123.93802473
hc9=1.09675043
hco9=109.81240433
dih9=-121.05949083
ho10=0.96445505
hoc10=107.75933801
dih10=-65.73836235
cc11=1.52844267
ccc11=114.12681465
dih11=-63.79412816
hc12=1.09547326
hcc12=107.79080094
dih12=122.27465174
hc13=1.0920858
hcc13=107.39050336
dih13=-122.55345301
cc14=1.52919621
ccc14=113.09245572
dih14=-179.29113187
hc15=1.09527498
hcc15=109.17431701
dih15=121.76195247
hc16=1.09163104
hcc16=109.08793456
dih16=-122.39591224
cc17=1.52888915
ccc17=113.48602293
dih17=179.82146433

hc18=1.09517538
 hcc18=109.20251676
 dih18=122.08361151
 hc19=1.09525856
 hcc19=109.42257032
 dih19=-122.29565806
 cc20=1.5292262
 ccc20=113.68995944
 dih20=179.80357664
 hc21=1.0953224
 hcc21=109.28050095
 dih21=122.22763211
 hc22=1.09513822
 hcc22=109.24341012
 dih22=-122.25373697
 cc23=1.52785928
 ccc23=113.30298921
 dih23=179.97991467
 hc24=1.09424725
 hcc24=109.18013435
 dih24=122.24655698
 hc25=1.0942698
 hcc25=109.19446542
 dih25=-122.26147551
 hc26=1.09096981
 hcc26=111.49465673
 dih26=179.98284058
 hc27=1.09206785
 hcc27=111.17489839
 dih27=120.13888698
 hc28=1.09204666
 hcc28=111.17005291
 dih28=-120.14008478

1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol

C
 C, 1, cc2
 C, 1, cc3, 2, ccc3
 C, 3, cc4, 1, ccc4, 2, dih4, 0
 C, 4, cc5, 3, ccc5, 1, dih5, 0
 C, 5, cc6, 4, ccc6, 3, dih6, 0
 C, 6, cc7, 5, ccc7, 4, dih7, 0
 Cl, 3, clc8, 1, clcc8, 4, dih8, 0
 H, 4, hc9, 3, hcc9, 5, dih9, 0
 H, 5, hc10, 4, hcc10, 6, dih10, 0
 H, 6, hc11, 5, hcc11, 4, dih11, 0

| | | | | | | | |
|----|-----|-------|-----|--------|-----|--------|---|
| H, | 7, | hc12, | 6, | hcc12, | 5, | dih12, | 0 |
| H, | 2, | hc13, | 1, | hcc13, | 3, | dih13, | 0 |
| O, | 2, | oc14, | 1, | occ14, | 13, | dih14, | 0 |
| O, | 2, | oc15, | 1, | occ15, | 13, | dih15, | 0 |
| H, | 15, | ho16, | 2, | hoc16, | 1, | dih16, | 0 |
| C, | 14, | co17, | 2, | coc17, | 1, | dih17, | 0 |
| H, | 17, | hc18, | 14, | hco18, | 2, | dih18, | 0 |
| H, | 17, | hc19, | 14, | hco19, | 18, | dih19, | 0 |
| H, | 17, | hc20, | 14, | hco20, | 18, | dih20, | 0 |

Variablen:

cc2=1.51596522
cc3=1.39638362
ccc3=121.56054088
cc4=1.38851342
ccc4=121.59673086
dih4=178.00167593
cc5=1.3880974
ccc5=119.61728276
dih5=-0.34771529
cc6=1.38879042
ccc6=119.88971328
dih6=0.38045628
cc7=1.38808633
ccc7=119.88863483
dih7=-0.00859343
clc8=1.75602923
clcc8=120.78431074
dih8=179.5229653
hc9=1.08008733
hcc9=119.45000042
dih9=179.96766559
hc10=1.08157372
hcc10=119.57109222
dih10=179.6773272
hc11=1.08140518
hcc11=120.27635288
dih11=179.55677919
hc12=1.07965617
hcc12=120.42179233
dih12=178.66126618
hc13=1.09286156
hcc13=110.70229759
dih13=39.7322977
oc14=1.40329791
occ14=108.34081549
dih14=120.61956915

oc15=1.41618986
 occ15=111.61354369
 dih15=-115.56448603
 ho16=0.96437651
 hoc16=108.03068925
 dih16=-50.01270007
 co17=1.42101957
 coc17=113.74642709
 dih17=-170.72879478
 hc18=1.08737868
 hco18=106.75444953
 dih18=178.73514636
 hc19=1.09114771
 hco19=111.44791772
 dih19=119.66182766
 hc20=1.09536839
 hco20=110.8886661
 dih20=-118.75147718

1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol

C
 C, 1, cc2
 C, 1, cc3, 2, ccc3
 C, 3, cc4, 1, ccc4, 2, dih4, 0
 C, 4, cc5, 3, ccc5, 1, dih5, 0
 C, 5, cc6, 4, ccc6, 3, dih6, 0
 C, 6, cc7, 5, ccc7, 4, dih7, 0
 Cl, 3, clc8, 1, clcc8, 4, dih8, 0
 H, 4, hc9, 3, hcc9, 5, dih9, 0
 H, 5, hc10, 4, hcc10, 6, dih10, 0
 H, 6, hc11, 5, hcc11, 4, dih11, 0
 H, 7, hc12, 6, hcc12, 5, dih12, 0
 H, 2, hc13, 1, hcc13, 3, dih13, 0
 O, 2, oc14, 1, occ14, 13, dih14, 0
 O, 2, oc15, 1, occ15, 13, dih15, 0
 H, 15, ho16, 2, hoc16, 1, dih16, 0
 C, 14, co17, 2, coc17, 1, dih17, 0
 C, 17, cc18, 14, cco18, 2, dih18, 0
 H, 17, hc19, 14, hco19, 18, dih19, 0
 H, 17, hc20, 14, hco20, 18, dih20, 0
 H, 18, hc21, 17, hcc21, 14, dih21, 0
 H, 18, hc22, 17, hcc22, 21, dih22, 0
 H, 18, hc23, 17, hcc23, 21, dih23, 0

Variablen:

cc2=1.51640734

cc3=1.39642635
ccc3=121.56027147
cc4=1.38853246
ccc4=121.61430322
dih4=178.02090188
cc5=1.38808204
ccc5=119.61955885
dih5=-0.35743867
cc6=1.38878726
ccc6=119.87895295
dih6=0.38331432
cc7=1.38811225
ccc7=119.88912633
dih7=-0.00046387
clc8=1.75613835
clcc8=120.78969693
dih8=179.51889364
hc9=1.08009198
hcc9=119.44835311
dih9=179.97047412
hc10=1.08157796
hcc10=119.57658011
dih10=179.68207587
hc11=1.08142548
hcc11=120.2739263
dih11=179.56312849
hc12=1.07964207
hcc12=120.40336433
dih12=178.66320642
hc13=1.09266116
hcc13=110.59100163
dih13=39.57625611
oc14=1.40220612
occ14=108.4632854
dih14=120.73380921
oc15=1.41709575
occ15=111.5083454
dih15=-115.38901141
ho16=0.96432834
hoc16=107.9849166
dih16=-50.61416089
co17=1.42898358
coc17=114.13873463
dih17=-169.40820698
cc18=1.51374278
cco18=108.37255193

dih18=179.21883513
 hc19=1.09236388
 hco19=109.70803406
 dih19=121.47068343
 hc20=1.09687419
 hco20=109.09315853
 dih20=-120.70439596
 hc21=1.09072133
 hcc21=110.10227213
 dih21=-179.28885093
 hc22=1.09002434
 hcc22=110.84280972
 dih22=119.99206324
 hc23=1.0901526
 hcc23=110.72997115
 dih23=-119.71715668

1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol

C

| | | | | | | | |
|-----|-----|-------|-----|--------|-----|--------|---|
| C, | 1, | cc2 | | | | | |
| C, | 1, | cc3, | 2, | ccc3 | | | |
| C, | 3, | cc4, | 1, | ccc4, | 2, | dih4, | 0 |
| C, | 4, | cc5, | 3, | ccc5, | 1, | dih5, | 0 |
| C, | 5, | cc6, | 4, | ccc6, | 3, | dih6, | 0 |
| C, | 6, | cc7, | 5, | ccc7, | 4, | dih7, | 0 |
| Cl, | 3, | clc8, | 1, | clcc8, | 4, | dih8, | 0 |
| H, | 4, | hc9, | 3, | hcc9, | 5, | dih9, | 0 |
| H, | 5, | hc10, | 4, | hcc10, | 6, | dih10, | 0 |
| H, | 6, | hc11, | 5, | hcc11, | 4, | dih11, | 0 |
| H, | 7, | hc12, | 6, | hcc12, | 5, | dih12, | 0 |
| H, | 2, | hc13, | 1, | hcc13, | 3, | dih13, | 0 |
| O, | 2, | oc14, | 1, | occ14, | 13, | dih14, | 0 |
| O, | 2, | oc15, | 1, | occ15, | 13, | dih15, | 0 |
| H, | 15, | ho16, | 2, | hoc16, | 1, | dih16, | 0 |
| C, | 14, | co17, | 2, | coc17, | 1, | dih17, | 0 |
| C, | 17, | cc18, | 14, | cco18, | 2, | dih18, | 0 |
| H, | 17, | hc19, | 14, | hco19, | 18, | dih19, | 0 |
| H, | 17, | hc20, | 14, | hco20, | 18, | dih20, | 0 |
| C, | 18, | cc21, | 17, | ccc21, | 14, | dih21, | 0 |
| H, | 18, | hc22, | 17, | hcc22, | 21, | dih22, | 0 |
| H, | 18, | hc23, | 17, | hcc23, | 21, | dih23, | 0 |
| H, | 21, | hc24, | 18, | hcc24, | 17, | dih24, | 0 |
| H, | 21, | hc25, | 18, | hcc25, | 24, | dih25, | 0 |
| H, | 21, | hc26, | 18, | hcc26, | 24, | dih26, | 0 |

Variablen:

cc2=1.51624065

cc3=1.39630153
ccc3=121.61674737
cc4=1.38859636
ccc4=121.61390809
dih4=177.96518845
cc5=1.38804031
ccc5=119.62464832
dih5=-0.39686945
cc6=1.38883129
ccc6=119.88067649
dih6=0.3410543
cc7=1.38806456
ccc7=119.87667307
dih7=0.04928659
clc8=1.75618708
clcc8=120.79643929
dih8=179.6040928
hc9=1.08009272
hcc9=119.44904083
dih9=179.99665911
hc10=1.08156915
hcc10=119.57730166
dih10=179.7208297
hc11=1.08142222
hcc11=120.27597647
dih11=179.62207568
hc12=1.07974162
hcc12=120.38216563
dih12=178.76143693
hc13=1.09240595
hcc13=110.64843587
dih13=38.22382937
oc14=1.40198616
occ14=108.47233528
dih14=120.7048864
oc15=1.41721707
occ15=111.44366905
dih15=-115.38361406
ho16=0.96432349
hoc16=108.02521281
dih16=-50.3013158
co17=1.42944109
coc17=114.21560638
dih17=-170.42084994
cc18=1.51819748
cco18=108.89381938

dih18=175.89943114
hc19=1.0922316
hco19=109.63725418
dih19=121.45510763
hc20=1.09807395
hco20=109.0817972
dih20=-120.69753519
cc21=1.52764723
ccc21=113.84414258
dih21=-64.1452819
hc22=1.09286594
hcc22=108.53525897
dih22=123.01981177
hc23=1.09330114
hcc23=107.54876654
dih23=-122.14483707
hc24=1.09059126
hcc24=111.08995494
dih24=179.80694156
hc25=1.09218317
hcc25=111.022199
dih25=119.81235066
hc26=1.08933905
hcc26=111.0582281
dih26=-120.31466079

8.2.5 Dampfdrücke

Tabelle 8.587: Dampfdrücke bei 298 K

| | $p_{M./G.}^S$ [bar] | $p_{C./G.}^S$ [bar] | $p_{J./R.}^S$ [bar] | p_W^S [bar] |
|--------------------------------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|
| Heptanal | $2,82 \cdot 10^{-3}$ | $2,20 \cdot 10^{-3}$ | $8,08 \cdot 10^{-3}$ | $2,72 \cdot 10^{-3}$ |
| Decanal | $1,17 \cdot 10^{-4}$ | $6,94 \cdot 10^{-5}$ | $1,83 \cdot 10^{-4}$ | $1,07 \cdot 10^{-4}$ |
| 2-Chlorbenzaldehyd | $3,94 \cdot 10^{-4}$ | - | $2,70 \cdot 10^{-4}$ | $2,45 \cdot 10^{-4}$ |
| 3-Phenylpropanal | $1,24 \cdot 10^{-4}$ | $2,11 \cdot 10^{-4}$ | $2,17 \cdot 10^{-4}$ | $1,88 \cdot 10^{-4}$ |
| 1-Methoxyethanol | $4,33 \cdot 10^{-2}$ | $3,17 \cdot 10^{-2}$ | $1,57 \cdot 10^{-2}$ | $3,43 \cdot 10^{-2}$ |
| 1-Ethoxyethanol | $1,98 \cdot 10^{-2}$ | $1,24 \cdot 10^{-2}$ | $4,29 \cdot 10^{-3}$ | $1,48 \cdot 10^{-2}$ |
| 1-Propoxyethanol | $4,81 \cdot 10^{-3}$ | $2,80 \cdot 10^{-3}$ | $1,09 \cdot 10^{-3}$ | $5,46 \cdot 10^{-3}$ |
| 1-Methoxy-1-Propanol | $9,58 \cdot 10^{-3}$ | $7,16 \cdot 10^{-3}$ | $4,29 \cdot 10^{-3}$ | $7,63 \cdot 10^{-3}$ |
| 1-Ethoxy-1-Propanol | $4,81 \cdot 10^{-3}$ | $2,80 \cdot 10^{-3}$ | $1,09 \cdot 10^{-3}$ | $5,46 \cdot 10^{-3}$ |
| 1-Methoxy-1-Butanol | $2,37 \cdot 10^{-3}$ | $1,75 \cdot 10^{-3}$ | $1,09 \cdot 10^{-3}$ | $3,09 \cdot 10^{-3}$ |
| 1-Methoxy-1-Heptanol | $6,80 \cdot 10^{-5}$ | $3,39 \cdot 10^{-5}$ | $1,16 \cdot 10^{-5}$ | $9,59 \cdot 10^{-5}$ |
| 1-Methoxy-1-Decanol | $4,39 \cdot 10^{-6}$ | $8,80 \cdot 10^{-7}$ | $2,30 \cdot 10^{-7}$ | $4,18 \cdot 10^{-6}$ |
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol | $5,69 \cdot 10^{-6}$ | - | $8,60 \cdot 10^{-7}$ | $1,24 \cdot 10^{-5}$ |
| 1-Ethoxy-2-Chlorbenzylalkohol | $4,97 \cdot 10^{-6}$ | - | $2,60 \cdot 10^{-7}$ | $7,42 \cdot 10^{-6}$ |
| 1-Propoxy-2-Chlorbenzylalkohol | $2,37 \cdot 10^{-6}$ | - | $2,70 \cdot 10^{-7}$ | $3,00 \cdot 10^{-6}$ |
| 1-Methoxy-3-Phenylpropanol | $4,18 \cdot 10^{-6}$ | $2,57 \cdot 10^{-6}$ | $2,40 \cdot 10^{-7}$ | $8,48 \cdot 10^{-6}$ |
| 1-Ethoxy-3-Phenylpropanol | $3,61 \cdot 10^{-6}$ | $1,02 \cdot 10^{-6}$ | $2,70 \cdot 10^{-7}$ | $4,99 \cdot 10^{-6}$ |
| 1-Propoxy-3-Phenylpropanol | $1,73 \cdot 10^{-6}$ | $4,60 \cdot 10^{-7}$ | $4,00 \cdot 10^{-7}$ | $1,98 \cdot 10^{-6}$ |

Tabelle 8.588: Verdampfungsenthalpien bei 298 K [kJ/mol]

| | $\Delta h_{V,M./G.}$ | $\Delta h_{V,C./G.}$ | $\Delta h_{V,J./R.}$ | $\Delta h_{V,W.}$ |
|--------------------------------|----------------------|----------------------|----------------------|-------------------|
| Heptanal | 48,87 | 47,1 | 46,19 | 49,76 |
| Decanal | 63,6 | 61,05 | 60,58 | 61,49 |
| 2-Chlorbenzaldehyd | - | 57,16 | 57,46 | 56,96 |
| 3-Phenylpropanal | 59,41 | 55,06 | 58,44 | 58,17 |
| 1-Methoxyethanol | 49,7 | 47,77 | 48,04 | 45,42 |
| 1-Ethoxyethanol | 54,13 | 48,44 | 53,02 | 48,00 |
| 1-Propoxyethanol | 59,04 | 53,09 | 58,23 | 49,17 |
| 1-Methoxy-1-Butanol | 59,52 | 57,07 | 58,23 | 51,38 |
| 1-Methoxy-1-Heptanol | 74,25 | 71,02 | 74,99 | 63,72 |
| 1-Methoxy-1-Decanol | 88,98 | 84,97 | 92,62 | 75,02 |
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol | 81,2 | 77,99 | - | - |
| 1-Methoxy-3-Phenylpropanol | 84,79 | 78,97 | 91,7 | 71,05 |

Tabelle 8.589: Antoine-Dampfdrücke bei 273 K

| | A | B | C | $p^S(273,15\text{ K}) [\text{bar}]$ |
|-------------|---------|---------|--------|-------------------------------------|
| Acetaldehyd | 16,2481 | 2465,15 | -37,15 | 0,441 |
| Propanal | 16,2315 | 2659,02 | -44,15 | 0,135 |
| Butanal | 16,1668 | 2839,09 | -50,15 | 0,041 |
| Methanol | 18,5875 | 3626,55 | -34,29 | 0,040 |
| Ethanol | 18,9119 | 3803,98 | -41,68 | 0,016 |
| 1-Propanol | 17,5439 | 3166,38 | -80,15 | 0,004 |

Tabelle 8.590: Dampfdrücke bei 273 K

| | $p_{M./G.}^S [\text{bar}]$ | $p_{C./G.}^S [\text{bar}]$ | $p_{J./R.}^S [\text{bar}]$ | $p_W^S [\text{bar}]$ |
|--------------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------|
| Heptanal | $4,64 \cdot 10^{-4}$ | $3,85 \cdot 10^{-4}$ | $1,46 \cdot 10^{-3}$ | $4,32 \cdot 10^{-4}$ |
| Decanal | $1,12 \cdot 10^{-5}$ | $7,27 \cdot 10^{-6}$ | $1,95 \cdot 10^{-5}$ | $1,10 \cdot 10^{-5}$ |
| 2-Chlorbenzaldehyd | - | - | $3,23 \cdot 10^{-5}$ | $2,99 \cdot 10^{-5}$ |
| 3-Phenylpropanal | $1,38 \cdot 10^{-5}$ | $2,75 \cdot 10^{-5}$ | $2,50 \cdot 10^{-5}$ | $2,19 \cdot 10^{-5}$ |
| 1-Methoxyethanol | $6,89 \cdot 10^{-3}$ | $5,43 \cdot 10^{-3}$ | $2,66 \cdot 10^{-3}$ | $6,40 \cdot 10^{-3}$ |
| 1-Ethoxyethanol | $2,67 \cdot 10^{-3}$ | $2,07 \cdot 10^{-3}$ | $6,05 \cdot 10^{-4}$ | $2,51 \cdot 10^{-3}$ |
| 1-Propoxyethanol | $5,42 \cdot 10^{-4}$ | $3,94 \cdot 10^{-4}$ | $1,27 \cdot 10^{-4}$ | $8,87 \cdot 10^{-4}$ |
| 1-Methoxy-1-Butanol | $2,62 \cdot 10^{-4}$ | $2,12 \cdot 10^{-4}$ | $1,27 \cdot 10^{-4}$ | $4,63 \cdot 10^{-4}$ |
| 1-Methoxy-Heptanol | $4,37 \cdot 10^{-6}$ | $2,45 \cdot 10^{-6}$ | $7,23 \cdot 10^{-7}$ | $9,10 \cdot 10^{-6}$ |
| 1-Methoxy-1-Decanol | $1,64 \cdot 10^{-7}$ | $3,81 \cdot 10^{-8}$ | $7,50 \cdot 10^{-9}$ | $2,61 \cdot 10^{-7}$ |
| 1-Methoxy-2-Chlorbenzylalkohol | $2,83 \cdot 10^{-7}$ | - | - | - |
| 1-Methoxy-3-Phenylpropanol | $1,82 \cdot 10^{-7}$ | $1,39 \cdot 10^{-7}$ | $8,10 \cdot 10^{-9}$ | $6,14 \cdot 10^{-7}$ |

Tabelle 8.591: Dampfdrücke von 1-Methoxyethanol bei 253 K

| | $p_{M./G.}^S [\text{bar}]$ | $p_{C./G.}^S [\text{bar}]$ | $p_{J./R.}^S [\text{bar}]$ | $p_W^S [\text{bar}]$ |
|------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------|
| 1-Methoxyethanol | $1,22 \cdot 10^{-3}$ | $1,03 \cdot 10^{-3}$ | $4,98 \cdot 10^{-4}$ | $1,32 \cdot 10^{-3}$ |

8.2.6 Berechnete Gleichgewichtskonstanten

Tabelle 8.592: Berechnete Gleichgewichtskonstanten für 1-Methoxy-1-Propanol

| | | Gasphase | Flüssige Phase | | | |
|-----|------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| V | Basissatz | K_{Gas} | $K_{M./G.}$ | $K_{C./G.}$ | $K_{J./R.}$ | K_W |
| I | 6-31G(d) - scale | 0,585 | 4,380 | 5,859 | 9,775 | 5,497 |
| I | cc-pVTZ - scale | $7,083 \cdot 10^{-5}$ | $5,307 \cdot 10^{-4}$ | $7,100 \cdot 10^{-4}$ | $1,184 \cdot 10^{-3}$ | $6,661 \cdot 10^{-4}$ |
| II | 6-31G(d) - scale | 0,026 | 0,196 | 0,263 | 0,438 | 0,246 |
| II | cc-pVTZ - scale | $5,528 \cdot 10^{-5}$ | $4,142 \cdot 10^{-4}$ | $5,541 \cdot 10^{-4}$ | $9,244 \cdot 10^{-4}$ | $5,198 \cdot 10^{-4}$ |
| III | 6-31G(d) - scale | 0,716 | 5,369 | 7,182 | 11,981 | 6,738 |
| III | cc-pVTZ - scale | $8,415 \cdot 10^{-5}$ | $6,306 \cdot 10^{-4}$ | $8,435 \cdot 10^{-4}$ | $1,407 \cdot 10^{-3}$ | $7,914 \cdot 10^{-4}$ |

Tabelle 8.593: Berechnete Gleichgewichtskonstanten für 1-Ethoxy-1-Propanol

| | | Gasphase | Flüssige Phase | | | |
|-----|------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| V | Basissatz | K_{Gas} | $K_{M./G.}$ | $K_{C./G.}$ | $K_{J./R.}$ | $K_W.$ |
| I | 6-31G(d) - scale | 0,098 | 0,680 | 1,166 | 2,997 | 0,599 |
| I | cc-pVTZ - scale | $3,677 \cdot 10^{-5}$ | $2,559 \cdot 10^{-4}$ | $4,389 \cdot 10^{-4}$ | $1,128 \cdot 10^{-3}$ | $2,254 \cdot 10^{-4}$ |
| II | 6-31G(d) - scale | 0,009 | 0,065 | 0,111 | 0,286 | 0,057 |
| II | cc-pVTZ - scale | $2,612 \cdot 10^{-5}$ | $1,818 \cdot 10^{-4}$ | $3,118 \cdot 10^{-4}$ | $8,011 \cdot 10^{-4}$ | $1,601 \cdot 10^{-4}$ |
| III | 6-31G(d) - scale | 0,106 | 0,736 | 1,263 | 3,244 | 0,648 |
| III | cc-pVTZ - scale | $4,122 \cdot 10^{-5}$ | $2,869 \cdot 10^{-4}$ | $4,921 \cdot 10^{-4}$ | $1,264 \cdot 10^{-3}$ | $2,527 \cdot 10^{-4}$ |

Tabelle 8.594: Berechnete Gleichgewichtskonstanten für 1-Methoxy-1-Butanol

| | | Gasphase | Flüssige Phase | | | |
|-----|------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| V | Basissatz | K_{Gas} | $K_{M./G.}$ | $K_{C./G.}$ | $K_{J./R.}$ | $K_W.$ |
| I | 6-31G(d) - scale | 0,097 | 1,037 | 1,405 | 2,249 | 0,793 |
| I | cc-pVTZ - scale | $8,094 \cdot 10^{-5}$ | $8,641 \cdot 10^{-4}$ | $1,171 \cdot 10^{-3}$ | $1,875 \cdot 10^{-3}$ | $6,609 \cdot 10^{-4}$ |
| II | 6-31G(d) - scale | 0,029 | 0,312 | 0,423 | 0,678 | 0,239 |
| II | cc-pVTZ - scale | $6,980 \cdot 10^{-5}$ | $7,452 \cdot 10^{-4}$ | $1,010 \cdot 10^{-3}$ | $1,617 \cdot 10^{-3}$ | $5,699 \cdot 10^{-4}$ |
| III | 6-31G(d) - scale | 0,135 | 1,443 | 1,955 | 3,130 | 1,103 |
| III | cc-pVTZ - scale | $1,078 \cdot 10^{-4}$ | $1,151 \cdot 10^{-3}$ | $1,560 \cdot 10^{-3}$ | $2,497 \cdot 10^{-3}$ | $8,803 \cdot 10^{-4}$ |

Tabelle 8.595: Berechnete Gleichgewichtskonstanten für 1-Methoxy-1-Heptanol

| | | Gasphase | Flüssige Phase | | | |
|-----|------------------|-----------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| V | Basissatz | K_{Gas} | $K_{M./G.}$ | $K_{C./G.}$ | $K_{J./R.}$ | $K_W.$ |
| I | 6-31G(d) - scale | 0,094 | 0,658 | 1,028 | 11,068 | 0,449 |
| I | cc-pVTZ - scale | 7,816E-05 | $5,490 \cdot 10^{-4}$ | $8,578 \cdot 10^{-4}$ | $9,237 \cdot 10^{-3}$ | $3,744 \cdot 10^{-4}$ |
| II | 6-31G(d) - scale | 0,024 | 0,171 | 0,267 | 2,879 | 0,117 |
| III | 6-31G(d) - scale | 0,272 | 1,908 | 2,981 | 32,101 | 1,301 |

Tabelle 8.596: Berechnete Gleichgewichtskonstanten für 1-Methoxy-1-Decanol

| | | Gasphase | Flüssige Phase | | | |
|-----|------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| V | Basissatz | K_{Gas} | $K_{M./G.}$ | $K_{C./G.}$ | $K_{J./R.}$ | $K_W.$ |
| I | 6-31G(d) - scale | 0,082 | 0,371 | 1,095 | 11,065 | 0,354 |
| I | cc-pVTZ - scale | $6,760 \cdot 10^{-5}$ | $3,056 \cdot 10^{-4}$ | $9,024 \cdot 10^{-4}$ | $9,117 \cdot 10^{-3}$ | $2,920 \cdot 10^{-4}$ |
| II | cc-pVTZ - scale | 0,016 | 0,072 | 0,213 | 2,152 | 0,069 |
| III | 6-31G(d) - scale | 0,198 | 0,893 | 2,638 | 26,657 | 0,854 |

Betreute Studien- und Diplomarbeiten

- keine -

Lebenslauf

Silke Jaubert, geb. Breyer

Studium

10/1998 - 06/2004 Studiengang Maschinenbau und Verfahrenstechnik
an der Technischen Universität Kaiserslautern,
Vertiefungsrichtung Verfahrenstechnik,
Abschluss Diplom-Ingenieur

Wissenschaftlicher Werdegang

09/2004 - 09/2008 Wissenschaftliche Mitarbeiterin am Lehrstuhl
für Technische Thermodynamik,
Prof. Dr.-Ing. G. Maurer,
Technische Universität Kaiserslautern